

Janusz Martan
Instytut Technologii Elektronowej
Politechniki Wrocławskiej

TEORETYCZNE PROBLEMY ZWIĄZANE Z OBLICZANIEM ZASIĘGU I ROZKŁADU KONCENTRACJI IMPLANTOWANYCH JONÓW W METALACH

W pracy przedstawiono problemy pojawiające się przy próbach teoretycznego obliczania zasięgu oraz rozkładu koncentracji implantowanych jonów. Rozkład Gaussa nie zawsze w pełni przedstawia profil koncentracji, dlatego podjęto próbę zastosowania rozkładu Pearsona do przedstawienia rozkładu koncentracji domieszek w ciele stałym. Implantacja dużymi dawkami powoduje zmianę kształtu rozkładu koncentracji z powodu występowania zjawiska rozpylania.

Wstęp

Ostatnie lata charakteryzują się gwałtownym rozwojem badań nad zastosowaniem implantacji jonowej do poprawy własności powierzchniowych metali. Można wyróżnić trzy główne nurty prowadzonych prac:

- metalurgia implantacyjna,
- zagadnienia związane z odpornością metali na korozję,
- poprawa własności mechanicznych warstwy wierzchniej metalu /wzrost mikrotwardości, modyfikacja współczynnika tarcia, wzrost odporności powierzchni metali na ścieranie/.

Niewielkie zasięgi jonów w metalach /0,1 - 0,5 μm / powodują trudności przy doświadczalnym badaniu procesów związanych z oddziaływaniem implantowanych jonów z metalem. Do tego celu nadają się w zasadzie jedynie jonowiskowe techniki analityczne /np. SIMS/, które są pracochłonne oraz kosztowne. Ważna jest więc umiejętność określenia zasięgu oraz rozkładu koncentracji na drodze teoretycznej /analitycznej, względnie numerycznej/.

Dawki jonów stosowane w implantacji jonów do metali są rzędu $10^{16} - 10^{18} \text{ cm}^{-2}$. Implantacja tak dużymi dawkami powoduje występowanie szeregu zjawisk, które są do pominięcia w czasie implantacji do materiałów półprzewodnikowych /dawki rzędu $10^{12} - 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ /.

Jednym z głównych efektów występujących w czasie implantacji dużymi dawkami jest zjawisko rozpylania implantowanej powierzchni, a w przypadku materiału wieloskładnikowego /np. stal/ mamy do czynienia z rozpyleniem selektywnym, co prowadzi do zmiany składu powierzchniowego w porównaniu z materiałem nieimplantowanym. Ponadto występują również zjawiska migracyjne. Gama stosowanych jonów w przypadku implantacji do metali jest o wiele większa niż przy implantacji do półprzewodników. Analiza wpływu implantacji na własności metali jest więc o wiele bardziej utrudniona niż w przypadku materiałów półprzewodnikowych.

Zasięg jonów w ciele stałym /targetcie/

Określenie zasięgu jonów w ciele stałym możliwe jest tylko przy użyciu rachunku statystycznego. Ze względu na złożoność zjawisk występujących w czasie wędrówki jonów wewnątrz materiału, określenie ich zasięgu możliwe jest tylko przy pewnych założeniach upraszczających. Zanedbuje się więc wpływ dyfuzji termicznej oraz wzmożonej dyfuzji radiacyjnej /enhanced radiation diffusion/ na zasięg jonów. Przy powyższych założeniach oddziaływanie pomiędzy jonami a implantowanym materiałem można podzielić na dwa typy:

- zderzenia sprężyste pomiędzy jonem a jądrem bombardowanego materiału,
- zderzenia niesprężyste pomiędzy jonem a elektronami atomów bombardowanego materiału.

Oba rodzaje zderzeń wpływają na zdolność hamowania jonu w ciele stałym, a tym samym na wielkość zasięgu jonu.

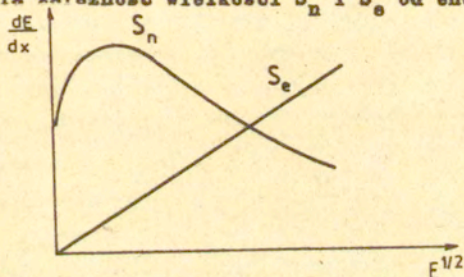
Średnia wielkość zasięgu jonu wewnątrz targetu wynosi

/1/

$$R = \frac{1}{N} \int_0^E \frac{dE}{S_n(E) + S_e(E)}$$

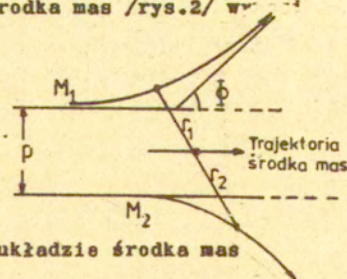
gdzie: N - gęstość atomowa materiału targetu, E - energia jonu a funkcje $S_n(E)$ i $S_e(E)$ opisują odpowiednio zdolność hamowania jonu w wyniku zderzeń sprężystych /hamowanie jądrowe/ i niesprężystych /hamowanie elektronowe/.

Rys.1 przedstawia zależność wielkości S_n i S_e od energii.



Rys.1. Wpływ energii na S_n i S_e

Dla mniejszych energii jonu dominują straty energii wywołane hamowaniem jądrowym, natomiast w zakresie energii większych straty w wyniku hamowania elektronowego. Efektem zderzenia jonu z jądrem atomu targetu jest nie tylko strata energii jonu, ale również odchylenie jego toru od kierunku początkowego o kąt Φ , który w układzie środka mas /rys.2/ wynosi:



Rys.2. Zderzenie cząstek w układzie środka mas

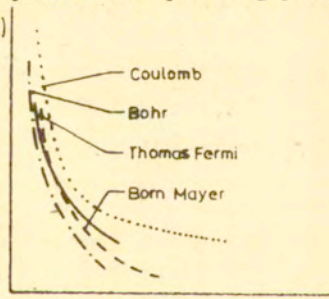
$$\Phi = \pi - 2p \int_0^{U_{max}} \frac{dU}{\sqrt{1 - [MU/E_r p^2 U^2]}}$$

gdzie: $U = \frac{Z}{r}$, $r = r_1 + r_2$ - odległość pomiędzy jonez a atomem targetu, U_{max} - odwrotność minimalnej odległości pomiędzy cząstkami, $K_r = \frac{EM}{2} \cdot \frac{1}{M_1 + M_2}$ - energia padającego jonu w układzie środka mas, M_1, M_2, Z_1, Z_2 to odpowiednio masy atomowe i liczby atomowe jonu i targetu, p - parametr zderzenia, $V U$ - potencjał oddziaływania pomiędzy cząstkami.

Najczęściej stosowanym potencjałem oddziaływania jest ekranowany potencjał Thomasa-Fermiego $V(r)$ [1]

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 \psi^2}{r (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \psi\left(\frac{r}{a}\right)$$

gdzie: $a = 0,8853 a_0 / (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}$, a_0 - promień ekranowania Bohra $/a_0 = 0,529 \text{ \AA}/$, $\psi\left(\frac{r}{a}\right)$ funkcja Thomasa-Fermiego. Oprócz potencjału Thomasa-Fermiego używa się również potencjału Bohra, Born-Mayera, Meliera, Lenz-Jensena oraz tzw. "potencjał uniwersalny" [2]. Rys. 3 przedstawia przebieg poszczególnych rodzajów potencjałów $V(r)$



Rys.3. Przebieg różnego typu potencjałów oddziaływania [1]

Jedną z najbardziej rozpowszechnionych teorii opisujących ruch jonu wewnątrz amorficznego ciała stałego jest tzw. teoria LSS /opracowana przez Lindharda, Schiotta i Scharffa/. Teoria ta zakłada, że szelność hamowania elektrenowego wynosi

/2/
$$S_e = k E^{1/2}$$

gdzie:

$$k - \text{stała} = L_1^{1/6} \frac{0,079 \sqrt{Z_1 Z_2} (M_1 + M_2)^{3/2}}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/4} M_1^{3/2} M_2^{1/2}}$$

Natomiast szelność hamowania jądrowego S_n opisuje zależność:

/3/
$$S_n = D \cdot S_n(E)$$

gdzie: D - stała, ε - zredukowana energia a funkcja $\Delta_n(\varepsilon)$, przedstawiona zwykle w postaci wykresu lub tabeli, obliczona została przy założeniu, że oddziaływania pomiędzy cząstkami zachodzą według potencjału Thomasa-Fermiego.

W literaturze istnieje wiele aproksymacji $\Delta_n(\varepsilon)$, jednakże przydatność ich jest niewielka ze względu na niewielką dokładność lub też niemożliwość analitycznego obliczenia wartości zasięgu R /wyrażenie 1/. Aproksymacja $\Delta_n(\varepsilon)$ funkcją o postaci [3]:

$$/4/ \quad \Delta_n(\varepsilon) = A\sqrt{\varepsilon} [C + \exp(-B\sqrt{\varepsilon})]$$

gdzie: $A = 2.18$, $B = 1.845$, $C = 0.0179$ usuwa powyższe niedogodności. Dokładność wyrażenia /4/ dla $0,01 \leq \varepsilon \leq 10$ nie jest gorsza niż 12%. Podstawiając wyrażenie /2/ i /4/ do /1/ a następnie całkując otrzymujemy wyrażenie na średnią wartość zasięgu jonu wewnątrz oiała stałego

$$/5/ \quad R = P \left[\frac{\sqrt{\varepsilon}}{1+d} + \frac{1}{\beta(1+d)} \ln \frac{1+d + \frac{\alpha}{c} e^{-B\sqrt{\varepsilon}}}{1+d + \frac{\alpha}{c}} \right]$$

gdzie P, d, β - stałe.

Rozkład koncentracji domieszki w implantowanym materiale

Oprócz znajomości wartości zasięgu, do analizy zjawisk zachodzących w implantowanym materiale konieczna jest znajomość rozkładu koncentracji domieszki. Do wyznaczenia kształtu rozkładu koncentracji domieszki potrzebna jest znajomość tzw. momentów funkcji rozkładu. Moment pierwszy R_p jest rzutem średniego zasięgu R na kierunek padania jonu, moment drugi jest kwadratem odchylenia standardowego ΔR_p . Na podstawie znajomości momentów trzeciego i czwartego można obliczyć tzw. skośność γ i spłaszczenie β_1 . Momenty funkcji rozkładu wyznaczyć można rozwiązując równanie transportu Boltzmana /teoria LSS/ względnie przez zastosowanie tzw. modelu ruchu błędnego.

Najczęściej stosowaną metodą obliczania rozkładu koncentracji na podstawie znajomości momentów funkcji rozkładu jest dopasowanie odpowiedniego wyrażenia algebraicznego opisującego ten

rozkład. Najpowszechniej stosowanym rozkładem jest symetryczny rozkład Gaussa $C(x)$

$$/6/ \quad C(x) = \frac{N_0}{\sqrt{2\pi} \Delta R_p} \exp \left[- \frac{(x - R_p)^2}{2 \Delta R_p^2} \right]$$

gdzie: x - odległość mierzona od powierzchni targetu wzdłuż kierunku padania jonu, N_0 - dawka implantowanych jonów.

Do obliczenia rozkładu Gaussa wystarczy znajomość tylko dwóch pierwszych momentów funkcji rozkładu.

Badania eksperymentalne oraz obliczenia przeprowadzone metodą Monte-Carle wykazują, że rozkłady koncentracji bardzo często są niesymetryczne. W takim wypadku dokładność opisu profilu przez funkcję Gaussa jest niewystarczająca. Zaobowiązuje konieczność zastosowania rozkładu uwzględniającego wszystkie momenty funkcji rozkładu. Przy niewielkiej asymetryczności można zastosować tzw. zmodyfikowany rozkład Gaussa "zmontowany" z dwóch połówek symetrycznego rozkładu Gaussa, do wyznaczenia którego potrzebna jest znajomość trzech momentów funkcji rozkładu.

Rozkładem, który uwzględnia wszystkie cztery momenty funkcji rozkładu jest rozkład Paersona $f(x)$ o postaci:

$$/7/ \quad f(x) = K \left\{ 1 + \left(\frac{x}{a} \right)^2 \right\}^{-q} \exp \left\{ -\gamma \arctg \left(\frac{x}{a} \right) \right\}$$

gdzie stałą K otrzymuje się z warunku normalizacji

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = 1$$

a do wyznaczenia stałych a , q i γ potrzebna jest znajomość czterech momentów centralnych μ_n $n=1, 2, 3, 4$ / 1 tak

$$q = \frac{3(\beta_1 - \gamma - 1)}{2\beta_1 - 3\gamma - 6} + 1, \quad \gamma = \frac{\delta(\delta - 2)\gamma^{1/2}}{\{16(\delta - 1) - \gamma(\delta - 2)^2\}^{1/2}}$$

$$a = \frac{\mu_2}{16} [16(\delta - 1) - \gamma(\delta - 2)^2]^{1/2}$$

gdzie: $\beta_1 = \frac{\mu_4}{\mu_2^2}$, $\gamma^{1/2} = \frac{\mu_3}{\mu_2}$, $\delta = 2q - 2$

W celu obliczenia momentów centralnych wystarczy znajomość trzech momentów niecentralnych m_n / $n=1,2,3$, / [4]. Moment czwarty m_4 można wyznaczyć z zależności Gibbonsa [5]

$$\beta_1 = 2.8 + 2.4 \gamma^2$$

Dla przypadku implantacji ciężkich jonów o niewielkiej energii /tzn. gdy można przyjąć, że $S_n \gg S_e$ / i w oparciu o teorię ruchu błędnego można napisać wyrażenia na m_n [6]

$$m_1 = \mu_1 = \frac{A_1}{\left(\frac{u}{2} + B_1 + 1\right) Z} \epsilon^{B_1 + 1}$$

$$m_2 = \frac{m_1 A_1}{(B_1 + 1) Z} \epsilon^{B_1 + 1}$$

$$m_3 = \frac{3! A_1 m_2}{2 Z (3B_1 + \frac{u}{2} + 3)} \epsilon^{B_1 + 1}$$

gdzie: A_1, B_1, Z - stałe, $u = \frac{M_2}{M_1}$

Gdy założenie, że $S_n \gg S_e$ jest niesłuszne, momenty m_n można wyznaczyć tylko drogą obliczeń numerycznych.

Oprócz rozkładu Pearsona próbowano stosować również inne funkcje /np. funkcja Edgewortha/, jednak nie znalazły one większego zastosowania głównie ze względu na niewielkie różnice w stosunku do rozkładu Gaussa.

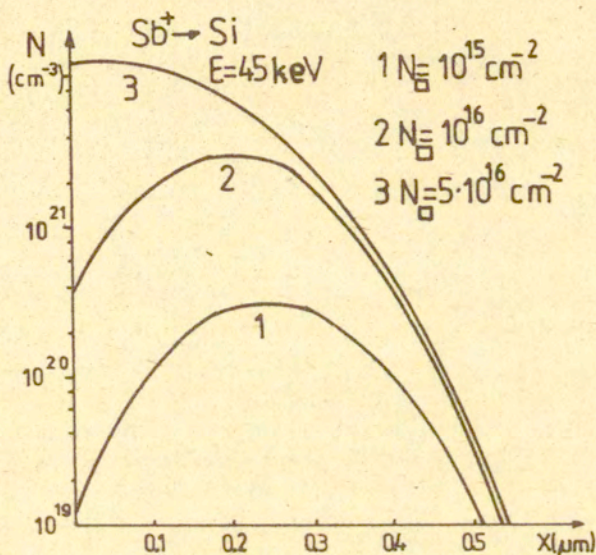
Implantacja dużymi dawkami

Dotychczas przedstawione problemy dotyczące określenia kształtu rozkładu koncentracji nie uwzględniały zjawisk występujących przy implantacji dużymi dawkami. Jednym z najbardziej zauważalnych efektów jest zjawisko rozpylania jonowego bombardowanej powierzchni. Wpływa ono w zasadniczy sposób na końcowy kształt rozkładu koncentracji, co ilustruje rys. 3.

Zakładając, że profil rozkładu jest gaussowski, można napisać następujące wyrażenie na jego zależność od implantowanej dawki

$$C_1(x) = \frac{N}{2S} \left(\operatorname{erf} \frac{x - R_p + d}{\sqrt{2} \Delta R_p} - \operatorname{erf} \frac{x - R_p}{\sqrt{2} \Delta R_p} \right)$$

gdzie: S - współczynnik rozpylania układu jon - target,
 d - grubość rozpylonej warstwy.



Rys. 4. Wpływ wielkości dawki na kształt rozkładu koncentracji implantowanych jonów

Dla profilu odbiegającego od profilu Gaussa wyrażenie na kształt rozkładu koncentracji można napisać w następującej postaci [2]

$$C(x, t) = \int_0^t G(x + vt') dt'$$

gdzie: v - prędkość rozpylania, G - szybkość implantacji

Zakończenie

Problemy związane z określeniem kształtu rozkładu koncentracji implantowanych jonów są złożone i do ich rozwiązania niezbędne są skomplikowane obliczenia numeryczne, które zresztą można przeprowadzić i tak tylko przy pewnych założeniach upraszczających. Wszystkie wymienione wcześniej problemy nabierają szczególnego znaczenia przy implantacji do materiałów

wieloskładnikowych /stałe/, gdzie zasięg i rozkład koncentracji powinno obliczać się dla każdego składnika materiału oddzielnie. W wielu przypadkach otrzymany rozkład jest tylko rozkładem wyjściowym, gdyż ulega zmianie w zależności od warunków pracy implantowanego detalu /np. wzmocniona dyfuzja spowodowana wzrostem temperatury itp/.

Literatura

- 1 H.RYSSEL, J.RUGE "Ionen-implantation" B.G.Teubner Stuttgart 1978
- 2 H.RYSSEL, H.GLAVISCHNIG "Ion implantation techniques" Springer Verlag Berlin Heidelberg New York 1982
- 3 J.MARTAN , Nuclear Instr. and Methods B2 1984 202-203
- 4 A.BJRENKOV et al. "Tablicy Parametrow Prostranstrennovo Razpredelenia Ionno - implantirovanykh Primesej", Izdatielstwo BGU im. Lenina, Minsk 1980
- 5 J.MARTAN, A.MULAK, Mat.Science and Eng. 69 /1985/ 21-23
- 6 J.GIBBONS, Handbook on Semiconductors Vol. 3, North-Holland Amsterdam 1980.