

## Determination of the surface binding energy for sputtering simulation of binary materials by gallium ions using Monte Carlo method

O.V. Podorozhniy, A.V. Rumyantsev, N.I. Borgardt

National Research University of Electronic Technology «MIET», Moscow, Zelenograd

Поверхностная энергия связи атомов	Постановка задачи
Зажным параметром, влияющим на корректность результатов	Цель работы: поиск оптимальной модели поверхностной энергии
иоделирования, проводимых с помощью метода Монте-Карло,	связи атомов при распылении бинарных материалов ионами галлия.
авляется поверхностная энергия связи (ПЭС) между атомами. При этом	<u>Поставленные задачи:</u>
её значения обычно определяются матрицей, размерность которой	•Выбрать способ определения значений поверхностной энергии связи
зависит от количества участвующих во взаимодействии сортов атомов.	атомов бинарных материалов, обеспечивающий оптимальные
Три увеличении числа элементов в материале подложки определение	результаты при расчётах методом Монте-Карло.
энергий связи всех участвующих в процессе атомов становится	<ul> <li>Провести моделирование взаимодействия ионов Ga<sup>+</sup> с материалами</li> </ul>
грудоёмким и стандартные подходы не всегда позволяют достичь	SiC и SiO <sub>2</sub> в пакете SDTrimSP и оценить применимость предложенной
довлетворительного результата [1].	модели на основе сравнения расчётных и экспериментальных данных.

## Стандартные модели расчёта поверхностной энергии связи



 $U_{\rm Ga} \sim C_{\rm Ga}, \ U_{\rm Si} \sim C_{\rm Si},$  $U_{\rm O} \sim C_{\rm O}$ 

	Ga	Si	0
Ga	U <sub>Ga-Ga</sub>	U <sub>Ga-Si</sub>	U <sub>Ga-O</sub>
Si	U <sub>Si-Ga</sub>	U <sub>Si-Si</sub>	U <sub>Si-O</sub>
Ο	U <sub>O-Ga</sub>	U <sub>O-Si</sub>	U <sub>O-O</sub>

**Discrete-continuous variation** 

model



В используемом пакете SDTrimSP [1] поверхностная энергия связи задаётся при помощи матрицы. В наиболее общем случае для каждого сорта атомов она рассчитывается на основе непрерывной модели (CVM), для которой энергии связи всех типов атомов пропорциональны их концентрациям. Элементы матрицы рассчитываются как среднее арифметическое значений энергий связи для химически чистых веществ. В предельном случае, когда энергии связи для всех типов атомов постоянны, такая модель становится дискретной (DVM). Схематические изображения распределения атомов для каждого случая приведены слева.

При этом полная энергия связи для атомов некоторого типа с

Ga	$U_{Ga-Ga}$	$U_{Ga-Ga}$	U <sub>Ga-Ga</sub>
Si	U <sub>Si-Si</sub>	U <sub>Si-Si</sub>	$U_{Si-Si}$
0	U <sub>O-O</sub>	U <sub>0-0</sub>	U <sub>0-0</sub>

атомов пучка и образца, а также

образованием преципитатов Ga

обуславливается низким

пределом растворимости Ga в

поэтому было решено обобщить

модель на бинарные системы.

Проведение моделирования

В рамках DVCM определению Для каждой пары значений

подлежат две величины: переменных рассчитывались

эффективная энергия U<sub>sio</sub> и коэффициент распыления Y и

параметр $lpha_{
m I}$ . Их нахождение пиковая концентрация  $C_{
m Ga}$ 

выполнялось путём имплантированного Ga, которые

использованием элементов такой матрицы вычисляется в следующем виде:

Расчет энергии связи с использованием элементов матрицы:

 $U_{\rm Si} = C_{\rm Ga} U_{\rm Si-Ga} + C_{\rm Si} U_{\rm Si-Si} + C_{\rm O} U_{\rm Si-O}$ 

## Дискретно-непрерывная модель расчёта поверхностной энергии связи

Для монокристаллического На примере SiO, из экспериментальных данных следует, что кремния была введена преобладающим типом связи как в кристаллическом, так и в дискретно-непрерывная модель аморфизованном при ионной бомбардировке, является расчёта (DCVM) [2], где энергии взаимодействие между атомами Si и O [4]. Данное свойство материала связи были пропорциональны позволяет в качестве упрощающего предположения ввести концентрациям с некоторым эффективную энергию  $U_{\rm sio}$ , а влияние атомов Ga, приводящее к коэффициентом альфа. Её ослаблению взаимодействия между атомами Si и O, учитывать использование определялось функцией  $\alpha(C_{si}, C_o)$ . Считая также, что распыление Ga происходит только слабым взаимодействием

 $U_{\rm Si} = U_{\rm O} = \alpha (C_{\rm Si}, C_{\rm O}) U_{\rm SiO}, U_{\rm Ga} = U_{\rm Ga-Ga}.$ 

Далее, раскладывая функцию  $\alpha(C_{si}, C_o)$  в ряд и проводя преобразования, в материале подложки, что для энергии связи атомов кремния и кислорода можно имеем следующее выражение:

$$U_{\rm O} = U_{\rm Si} = U_{\rm SiO} (C_{\rm Si} + C_{\rm O}) + (1 - \alpha_1) U_{\rm SiO} C_{\rm Ga}$$

Si. Экспериментально было обнаружено, что Ga также где  $\alpha_1 = \alpha_{Si} = \alpha_0, \alpha_{Si} = \partial \alpha / \partial C_{Si} \mid_{C_{Sin}}, \alpha_0 = \partial \alpha / \partial C_0 \mid_{C_{O_0}}, C_{Si_0} = 0,33; C_{O_0} = 0,67.$ образует преципитаты в SiO<sub>2</sub> [3],

Таким образом, приведённая ранее матрица ПЭС для дискретно-непрерывной модели принимает приведённый вид. Аналогичные выкладки и результат получаются и для SiC.

	00 -0		0
	Ga	Si	0
Ga	U <sub>Ga-Ga</sub>	U <sub>Ga-Ga</sub>	U <sub>Ga-Ga</sub>
Si	$(1-\alpha_1)U_{\rm SiO}$	U <sub>SiO</sub>	U <sub>SiO</sub>
0	$(1-\alpha_1)U_{\rm SiO}$	U <sub>SiO</sub>	U <sub>SiO</sub>

Результаты моделирования методом Монте-Карло По полученны M Distribution maps of function R for SiC and SiO<sub>2</sub> данным в Matlab была 1.0<sub>С</sub> с построена двумерная

моделирования в пакете сравнивались с сравнивались с общетите сравнивались с общетите сравнивались с общетите с равнивались с с общетите с равнивались с с общетите с равнивались в пределах от $U_{sio}$ в с шагом в 0,5 эВ, параметр $\alpha_1$ варьировался в пределах от 0 до 0,8 с шагом в 0,1; от 0,85 до 1,0 с шагом 0,05. • Энергия падающих ионов $E=30$ $R = \frac{(Y - Y_{exp})^2}{Y_{exp}^2} + \frac{(C_{Ga} - C_{Gaexp})^2}{C_{Gaexp}^2},$	карта распределения в е л и ч и н ы $R$ . П у н к т и р н ы м и $\alpha^{0.5}$ окружностями указаны положения минимумов ф у н к ц и и $R$ , оптимальные значения параметров приведены
кэВ, доза – $10^{17}$ ат/см <sup>2</sup> . • Количество траекторий – 30000. • $U_{\text{Ga-Ga}} = U_{\text{Ga-Si}} = U_{\text{Ga-O}} = 2,8$ эВ. Аналогично и для SiC. $\mathcal{I}_{\text{Ans}} \text{SiO}_2: Y_{\text{exp}} = 3,1; C_{\text{Ga exp}} = 0,27.$ Для SiC: $Y_{\text{exp}} = 2,1;[5] C_{\text{Ga exp}} = 0,25.$	В ТАблице. Им Соответствовали $Y=2,57, C_{Ga}=30,3$ ат.% Для SiC и $Y=3.28$ , $C_{Ga}=31.1$ ат.% Для SiO <sub>2</sub> . $DCVM$ $CVM$ $CVM$ $Experiment$ $Y, aT/uoH$ $C, aT.%$ $R$ $Y, aT/uOH$ $C, aT.%$ $R$ $Y, aT/uOH$ $C, aT.%$ $SiC$ $Z,57$ $SiO_3$ $SiO_2$ $SiO$
Литература 1. Mutzke A. // SDTrimSP Version 5.05, 2015. 2. Borgardt N.I. // Mater. Res. Express 2018 V. 5 P. 025905. 3. Stumpf F. // J. Appl. Phys. 2018 V. 123 P. 125104. 4. Jiang W. // J. Appl. Phys. 2007 V. 101 P. 023524. 5. Veerapandian S.K.P. // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B 2015 V. 365 P.	Выводы В работе показано, что предложенная дискретно-непрерывная модель расчета поверхностной энергии связи атомов позволяет достичь лучших результатов моделирования распыления галлиевым фокусированным ионным пучком бинарных материалов, таких как SiC и SiO <sub>2</sub> , по сравнению со стандартными способами, реализованными в программном пакете SDTrimSP.