Optimization of interatomic interaction parameters for Monte Carlo simulation of silicon irradiation with gallium ions

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

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

Поверхностная энергия связи атомов

Метод фокусированного ионного пучка (ФИП) применяется для прецизионного формирования и модификации структур в современных нанотехнологиях. Его эффективное применение связано с детальным изучением механизмов взаимодействия ускоренных ионов с атомами вещества. Одним из наиболее широко распространённых подходов для таких исследований является компьютерное моделирование на основе метода Монте-Карло. Важным параметром, описывающим процессы распыления атомов образца и имплантации ионов пучка, является модель поверхностной энергии связи (ПЭС). Хотя её выбор существенно влияет на результаты моделирования, в настоящее время не предложено [1] универсального подхода для определения ПЭС.

Постановка задачи

Цель работы: оптимизация параметров межатомного взаимодействия при облучении монокристаллического Si ускоренными ионами Ga^+.

Поставленные задачи:

- Изготовить образцы монокристаллического Si для исследования методами просвечивающей электронной микроскопии и рентгеновского микроанализа.
- Провести моделирование взаимодействия ионов Ga^+ с подложкой Si в пакете SDTrimSP с использованием разных моделей расчёта ПЭС.
- Сравнить результаты моделирования с экспериментальными данными.

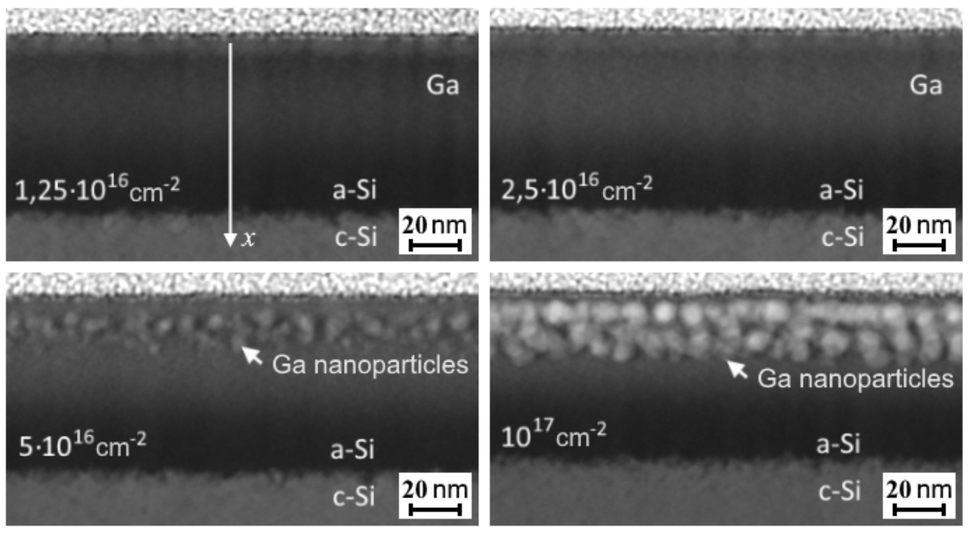
Изготовление и экспериментальное исследование тестовых структур

Образец монокристаллического кремния подвергался бомбардировке Ga^+ ФИП в электронно-ионном микроскопе Helios Nanolab 650 с дозой ионов, равной $1{,}25\cdot10^{16}$, $2{,}5\cdot10^{16}$, $5\cdot10^{16}$, 10^{17} см$^{-2}$, при фиксированном ускоряющем напряжении 30 кВ и токе пучка 230 пА.

Из полученных областей методом *in situ* lift-out [2] был изготовлен образец для исследования на просвечивающем электронном микроскопе Titan Themis 200.

При дозах облучения, равных $5\cdot10^{16}$ и 10^{17} см$^{-2}$ было установлено образование преципитатов атомов Ga.

Методом энергодисперсионного рентгеновского микроанализа из облучённых приповерхностных областей образца были получены карты распределения концентрации имплантированного галлия. Профили концентрации атомов галлия по глубине были получены путём усреднения карт в направлении, перпендикулярном оси *x*.



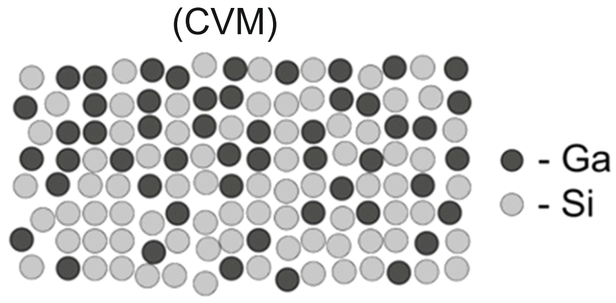
STEM images of the Ga^+ irradiated areas in Si with different ion doses showing precipitate formation at higher doses

Модели расчёта поверхностной энергии связи

Типичные задачи, решаемые при помощи метода ФИП, приводят к накоплению значительного количества атомов галлия в подложке. Поэтому для корректного моделирования необходимо учитывать величины ПЭС как для кремния U_{Si}, так и для галлия U_{Ga}. В используемом программном пакете SDTrimSP 5.07 [1] в общем случае они задаются на основе стандартной непрерывной модели (CVM), в которой энергии связи пропорциональны концентрациям атомов.

CVM не всегда позволяет адекватно описывать взаимодействие ионов галлия с атомами кремния, поэтому в [3] была введена дискретно-непрерывная модель (DCVM), учитывающая слабое взаимодействие атомов кремния и галлия, а также то, что распыление галлия происходит преимущественно из преципитатов.

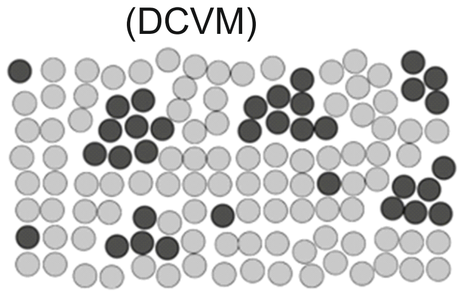
Continuous variation model (CVM)



$$U_{Si} = C_{Si}U_{Si\text{-}Si} + C_{Ga}U_{Si\text{-}Ga}$$

$$U_{Ga} = C_{Si}U_{Ga\text{-}Si} + C_{Ga}U_{Ga\text{-}Ga}$$

Discrete-continuous variation model (DCVM)



$$U_{Si} = C_{Si}U_{Si\text{-}Si} + C_{Ga}(1-\alpha_1)U_{Si\text{-}Si}$$

$$U_{Ga} = U_{Ga\text{-}Ga}$$

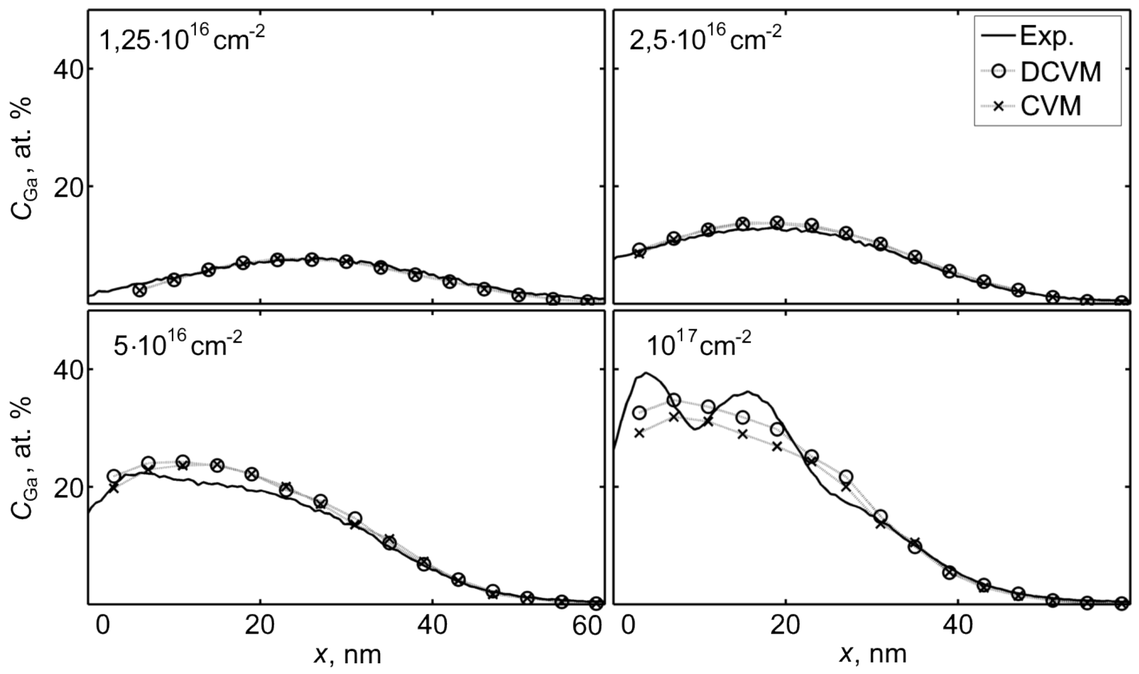
В DCVM энергии связи также, как и в CVM, пропорциональны концентрациям атомов, однако за счёт введения параметра α_1, характеризующего размер преципитатов Ga, удаётся достичь более медленного убывания энергии U_{Si} с ростом концентрации атомов Ga по сравнению с CVM, в рамках которой реализуется предельный случай $\alpha_1 = 1$.

Проведение моделирования методом Монте-Карло и сравнение результатов с экспериментальными данными

Моделирование проводилось в динамическом режиме с учётом имплантации ионов пучка в образец с использованием CVM и DCVM. В качестве значений параметров DCVM использовались полученные в [4] величины, равные $U_{Si\text{-}Si}$ = 4,7 эВ, $U_{Ga\text{-}Ga}$ = 3,5 эВ, α_1 = 0,2, полученные путём варьирования значений параметров DCVM для трёх ускоряющих напряжений: 8, 16 и 30 кВ при постоянной дозе, равной $5\cdot10^{17}$ см$^{-2}$ и сравнения результатов моделирования с экспериментальными данными.

Для малых доз облучения выбор модели ПЭС не влияет на совпадение экспериментальных и расчётных профилей и CVM позволяет хорошо описывать результаты эксперимента. Далее, начиная с дозы $5\cdot10^{16}$ см$^{-2}$, когда в экспериментальном образце образовываются преципитаты, появляются расхождения между профилями, которые достигают 5 ат. % для DCVM и 10 ат. % для CVM при увеличении дозы до 10^{17} см$^{-2}$. Таким образом, DCVM с использованием полученных значений параметров позволяет добиться лучшего совпадения профилей концентрации при высоких дозах облучения, чем CVM.

Значение $U_{Ga\text{-}Ga}$ = 3,5 эВ больше обычно используемой, известной из литературы величины энергии сублимации чистого галлия, равной 2,8 эВ. Вероятно, это связано с тем, что в эксперименте преципитаты галлия находятся на некотором удалении от поверхности образца, и распыление образующих их атомов требует большей энергии.



Experimental and calculated Ga atoms concentration profiles at different doses

Литература

1. Mutzke A. // SDTrimSP Version 5.05, 2015.
2. Mayer J. // MRS bulletin. 2007 V. 32 pp. 400-407.
3. Borgardt N.I. // Mat. Res. Exp. 2018 V. 5 P. 025905S.
4. Подорожний О.В. // Мат. Конф. Микроэлектроника и Информатика – 2023, Москва, МИЭТ.

Выводы

В работе показано, что полученные параметры дискретно-непрерывной модели ПЭС позволяют точнее по сравнению с непрерывной моделью предсказывать форму профилей концентрации имплантированного галлия при высоких дозах облучения для моделирования бомбардировки кремния методом Монте-Карло.