

# **Компьютерное моделирование процесса ионной имплантации методом бинарных столкновений**

А.В. Назаров, Д.С. Киреев

## **Введение**

Ионная имплантация – метод контролируемого введения примеси в материал посредством облучения пучком ускоренных ионов. Глубина внедрения примеси при использовании данного метода может варьироваться от нанометров до микрометров и определяется энергией ионов. Концентрация внедряемой примеси может контролироваться с высокой точностью и определяется флуенсом облучения. Флуенсом называют величину, равную число ионов, упавших на единицу площади поверхности мишени. При ионной имплантации с высоким флуенсом внедрённая примесь может формировать наноразмерные структуры, такие как квантовые точки.

Метод ионной имплантации позволяет прецизионно формировать в мишени модифицированные области с необходимыми пространственными размерами и концентрацией примесей, позволяя изменять электрофизические, механические, химические и другие свойства материала. Так, например, посредством имплантации донорной или акцепторной примеси в собственный полупроводник можно влиять на количество носителей заряда в полупроводнике, тем самым изменяя проводимость.

Для определения параметров ионной имплантации, необходимых для достижения заданных свойств легируемых областей, а также для прогнозирования вносимых в мишень изменений необходим эффективный метод расчета, либо моделирования характеристик модифицированной ионным облучением области мишени. На практике наиболее широкое распространение получило компьютерное моделирование методом Монте-Карло в приближении бинарных столкновений. В частности, наиболее широко используемой программной реализацией является программный пакет SRIM [<http://www.srim.org/>]. Данный метод позволяет рассчитывать

пространственное распределение внедренной примеси, создаваемых в мишени дефектов, число расплывших атомов поверхности и ряд других величин для различных комбинаций материала мишени и сорта падающих ионов в широком диапазоне энергий ионного пучка.

Целью настоящей задачи является ознакомление с некоторыми аспектами процесса ионной имплантации с помощью компьютерного моделирования в программном пакете SRIM. В задаче предлагается произвести расчёт профилей внедренной примеси по глубине для различных комбинаций материала мишени и сорта падающих ионов, а также расчет электрофизических параметров легированных слоёв.

## **1. Общие сведения о взаимодействии ионов с веществом**

При бомбардировке мишени ускоренными ионами происходит комплекс сопутствующих физических процессов (рис. 1). В результате соударений с атомами мишени бомбардирующие частицы передают им часть своей кинетической энергии. Это приводит к развитию в приповерхностном слое каскада атомных столкновений, следствием которого является эмиссия частиц (атомов или ионов) с поверхности образца, а также образование радиационно-индуцированных дефектов. Небольшая доля падающих ионов может претерпевать упругое обратное рассеяние на атомах мишени. При этом значительная доля ионов проникает вглубь мишени, теряет энергию и останавливается в материале мишени. Такое введение примеси в облучаемый материал и называется ионной имплантацией.

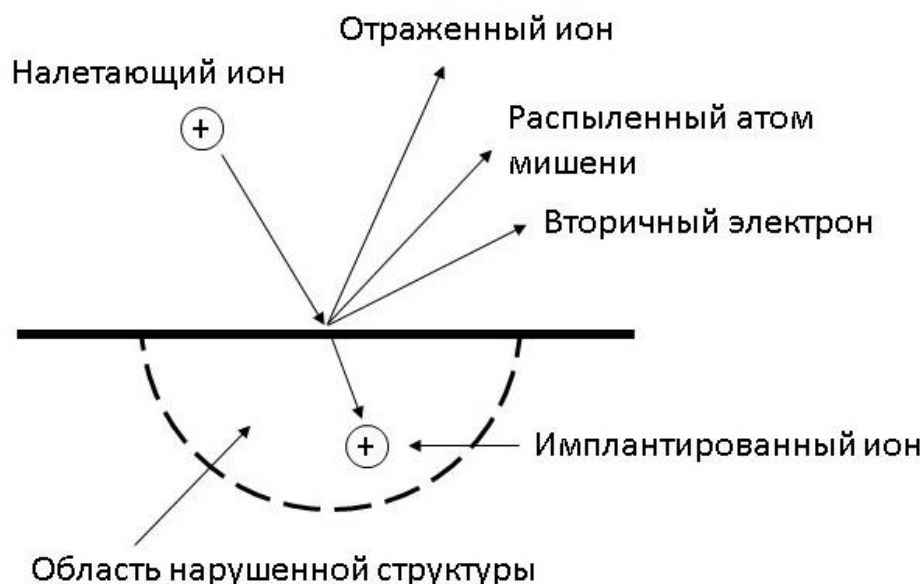


Рис. 1. Основные процессы, происходящие в результате взаимодействия ускоренного иона с поверхностью.

Двигаясь в среде, заполненной атомами (в частности, в твердом теле), быстрая частица теряет энергию на кулоновское взаимодействие с атомами среды. Одна часть этих потерь идет на ионизацию и возбуждение атомов (неупругие потери энергии), другая часть – на упругие столкновения [1].

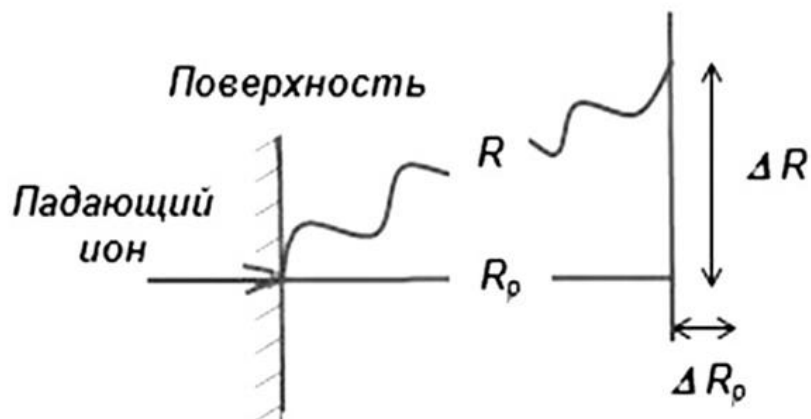


Рис. 2. Пробег иона в мишени.

Описанные потери энергии происходят на протяжении всего движения иона в среде, вплоть до полной остановки. Расстояние, пройденное ионом от точки входа до точки остановки, называется (траекторной) длиной пробега  $R$ .

Наибольшее практическое значение, однако, имеет не полный пробег, а его проекция на начальное направление движения иона – проективный пробег  $R_p$  (рис. 2). В связи с тем, что торможение иона является статистическим процессом, определяемым большим числом взаимодействий с атомами и электронами мишени, величина проективного пробега не является одинаковым для каждого проникающего в мишень иона, а обладает некоторым распределением по глубине мишени. В общем случае это распределение несимметрично, причём моменты этого распределения зависят как от параметров облучения, так и от сорта налетающих ионов, и от материала и кристаллической структуры мишени. В общем случае глубинные профили имплантированной примеси хорошо описываются распределением Пирсона IV [2]. Такое описание является довольно сложным, однако при небольших энергиях имплантации, т.е. при относительно небольших  $\langle R_p \rangle$  (до сотен нанометров) в качестве приближения с хорошей точностью можно использовать более простое распределение Гаусса:

$$N(x) = \frac{\Phi}{\sqrt{2\pi\Delta R_p^2}} \exp\left(-\frac{(x - \langle R_p \rangle)^2}{2\Delta R_p^2}\right), \quad (1.2)$$

Для расчетов используют средний проективный пробег  $R_p$ , соответствующий максимуму распределения;  $\Delta R_p$  – дисперсия пробегов ионов, определяющая ширину распределения (рис. 3).

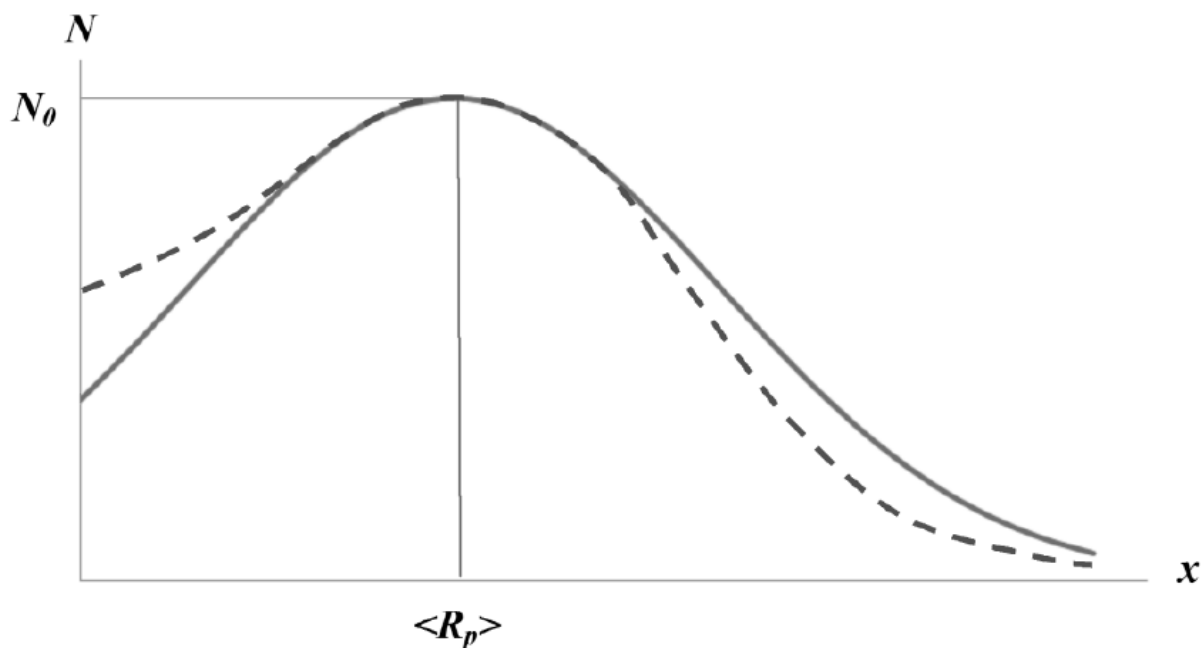


Рис. 3. Распределение Гаусса (слошная кривая) и Пирсона (штрихи).  $\langle R_p \rangle$  - средний проецированный пробег,  $N_0$  – максимум распределения.

## 2. Торможение ионов при движении в веществе

Потеря энергии иона при движении в твердом теле происходит за счет двух независимых механизмов: упругого (ядерное) и неупругого (электронное) торможений. Ядерное торможение вызвано упругими столкновениями с атомами мишени, при которых энергия передаётся преимущественно ядру. Положительно заряженные ионы рассеиваются на положительно заряженных ядрах атомов мишени за счет силы Кулона. Это кулоновское отталкивание «экранируется» облаком электронов, окружающим каждый атом. Степень экранировки зависит от сближения ядер иона и атома мишени и убывает с уменьшением расстояния между ядрами. Важно отметить, что сечение рассеяния иона на атоме мишени, сопровождающегося значительной передачей энергии, обратно пропорционально квадрату энергии иона. Поэтому упругие потери преобладают в диапазоне низких энергий (рис.4).

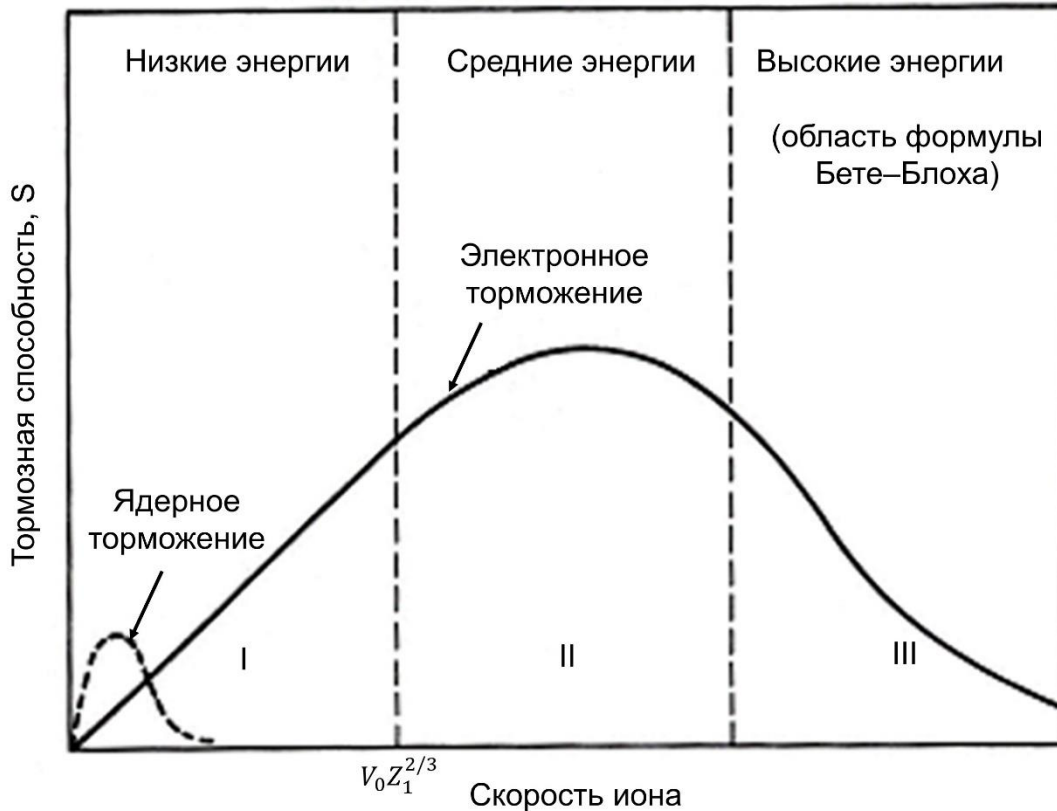


Рис.4. Зависимость ядерных и электронных потерь энергии от скорости иона.

Электронное торможение возникает из-за кулоновского взаимодействия иона с электронной подсистемой мишени, что приводит к возбуждению и ионизации атомов среды. При высоких скоростях иона (превышающих скорость движения электронов на орбиталях в квазиклассическом приближении) ион теряет все электроны, и в среде будет двигаться "голое" ядро с зарядом  $Z_1 e$ . Условие полной ионизации  $E_1 \geq \frac{M_1 Z_1 v_0^2}{2}$ , где  $v_0 = 2,2 \times 10^8$  см/с – скорость электрона на первой боровской орбите. При этом электронные потери значительно преобладают над ядерными. В случае, если энергия иона ниже указанного порога, средний эффективный заряд иона можно оценить как  $Z_{eff} = Z \frac{v}{v_0 Z^{2/3}}$ . При этом в области низких энергий важную роль начинают играть процессы электронного обмена между ионом и атомами среды. Таким образом, электронные потери в разных диапазонах энергии имеют различную зависимость от энергии и описываются различными моделями. В области

низких энергий они пропорциональны скорости иона:  $-\frac{dE}{dx} \propto v$ . В области высоких энергий электронные потери обратно пропорциональны квадрату скорости иона  $-\frac{dE}{dx} \propto \frac{1}{v^2}$ . Максимум электронных потерь энергии достигается в области средних энергий (рис.4).

Для задач ионной имплантации в полупроводники преимущественно характерен диапазон низких энергий, который и будет рассматриваться в рамках данной задачи.

## 2.1. Основные положения теории Линдхарда-Шарфа-Шиотта

Теория Линдхарда-Шарфа-Шиотта (ЛШШ) описывает торможение и распределение имплантированных ионов в твердом теле при энергиях от нескольких кэВ до сотен кэВ [3]. Энергетические потери для движущейся в твердом теле частицы можно описать выражением:

$$\frac{dE}{dx} = -N[S_e(E) + S_n(E)], \quad (2.1)$$

где  $E$  – энергия иона,  $N$  – объемная концентрация атомов мишени,  $S_n(E)$  – ядерная тормозная способность,  $S_e(E)$  – электронная тормозная способность. Отсюда можно получить выражение для пробега иона с начальной энергией  $E_0$ :

$$\langle R \rangle = \frac{1}{N} \int_0^{E_0} \frac{E}{[S_n(E) + S_e(E)]} dE \quad (2.2)$$

Расчёт ядерной тормозной способности возможен в рамках решения классической задачей теории рассеяния двух заряженных частиц [4]. Его механизм можно представить следующим образом:

1. Кинематика столкновения: Энергия, передаваемая атому мишени (энергия отдачи), определяется кинетической энергией иона, массами и зарядами сталкивающихся ядер, а также прицельным параметром.
2. Потенциал взаимодействия иона с атомами мишени: Взаимодействие описывается экранированным кулоновским потенциалом. Функция

экранировки, являющаяся функцией расстояния между атомами, определяет влияние электронных оболочек атомов на потенциал ядра.

Поскольку в процессе движения ион взаимодействует со множеством ядер мишени, общий эффект определяется интегрированием результата одиночного столкновения во всём диапазоне допустимых прицельных параметрах.

Прямое решение задачи осложнено трансцендентным характером уравнений, что не позволяет получить точные аналитические решения. Однако в качестве оценки, допустимо существенное упрощение модели. Оно основывается на двух ключевых допущениях:

1. Аппроксимация экранирования: вместо сложного потенциала используется простое экранированный потенциал вида  $V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2 a}{r^2}$ , где  $a$  — характерный радиус экранирования (порядка  $0.1 \text{ \AA}$ ), а  $r$  — расстояние между взаимодействующими ядрами.
2. Рассеяние преимущественно малоугловое. При малых углах рассеяния тригонометрические функции в уравнениях движения могут быть заменены их аргументами или приближены к единице.

Это преобразует исходные трансцендентные уравнения в алгебраические. В рамках данного, так называемого "нулевого" приближения, выражение для сечения ядерного торможения принимает вид, не зависящий от энергии:

$$S_n^0 = 2,8 \cdot 10^{-15} \cdot \frac{Z_1 Z_2}{\left(Z_1^{\frac{3}{2}} + Z_2^{\frac{3}{2}}\right)^{\frac{1}{2}}} \cdot \frac{M_1}{(M_1 + M_2)}, \quad (2.3)$$

где  $Z_1$  и  $M_1$  — порядковый атомный номер и атомная масса иона,  $Z_2$  и  $M_2$  — порядковый атомный номер и атомная масса атомов мишени. Для оценок сечения электронного торможения можно считать, что торможение пропорционально скорости или корню квадратному из кинетической энергии, т.е.

$$S_e = kE^{\frac{1}{2}}, \quad (2.4)$$

где коэффициент  $k$  – функция порядковых номеров и атомных масс иона и атомов мишени. Данная модель применима при условии, что средний эффективный заряд иона значительно меньше  $Z$ . Поскольку в ионной имплантации применяются энергии пучков в десятки и сотни кэВ, то это условие выполняется практически всегда.

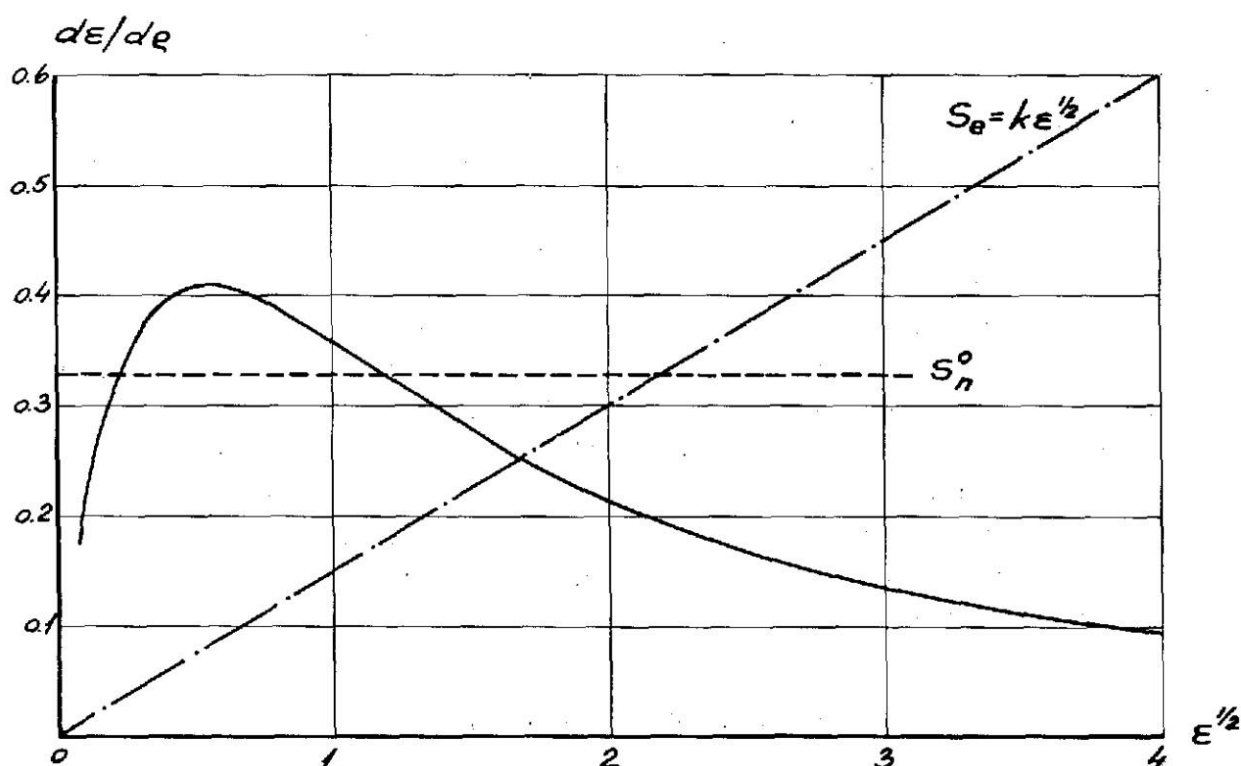


Рис.4. Вид зависимостей для сечений ядерного и электронного торможения. Абсцисса  $\epsilon^{1/2}$  – пропорциональна скорости  $v$ . Сплошная линия –  $(d\epsilon/dx)_n$ . Пунктирная линия соответствует выражению (2.3). Штрихпунктирная линия – сечение электронного торможения (см. выражение (2.4)) [5].

На рис.4 показан качественный вид зависимостей  $S_n^0$ ,  $S_n$  и  $S_e$  от энергии иона. Таким образом, выражения (2.5)-(2.8) позволяют оценить полный средний пробег. Ситуация упрощается, если преобладает один из двух механизмов торможения, т.е.  $S_n \gg S_e$  или  $S_n \ll S_e$ . Тогда для полного среднего пробега можно записать:

$$\langle R \rangle \approx 0,7E_0 \frac{\left( Z_1^{\frac{3}{2}} + Z_2^{\frac{3}{2}} \right)^{\frac{1}{2}}}{Z_1 Z_2} \frac{(M_1 + M_2)}{M_1}, \quad \text{для случая } S_n \gg S_e \quad (2.5)$$

$$\langle R \rangle \approx 20\sqrt{E_0}, \quad \text{для случая } S_n \ll S_e \quad (2.6)$$

$$N(x) = \frac{\Phi}{\sqrt{2\pi\Delta R_p^2}} \exp\left(-\frac{(x - \langle R_p \rangle)^2}{2\Delta R_p^2}\right), \quad (2.7)$$

Пробеги определяются следующими соотношениями:

$$\langle R_p \rangle \approx \frac{\langle R \rangle}{\left(1 + \frac{1}{3} \frac{M_2}{M_1}\right)} \quad \text{и} \quad (\Delta R_p)^2 \approx \frac{2}{3} \langle R_p \rangle^2 \cdot \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \quad (2.8)$$

### 3. Термический отжиг

Внедренные в мишень в результате ионной имплантации атомы примеси преимущественно занимают внеузловые положения в кристаллической решётке мишени, в результате чего они не являются электроактивными.

Помимо этого, процесс ионной имплантации сопровождается образованием радиационно-индуцированных дефектов (вакансии, междоузельные атомы). В процессе релаксации эти дефекты могут взаимодействовать друг с другом и с ионами внедряемой примеси, образуя сложные стабильные комплексы, которые являются электроактивными и вносят искажения в электронную структуру полупроводника.

В связи с этим, после проведения ионной имплантации проводят активационный термический отжиг — нагрев мишени в печи в инертной атмосфере. При этом внедренная примесь занимает узловые положения в кристаллической решётке, а также происходит восстановление кристаллической структуры мишени. Характерными параметрами отжига для кремния являются температура около 800°C и время порядка 30 минут. Однако,

в процессе отжига перераспределение и диффузия имплантированных атомов, в следствие чего происходит уширение профиля распределения имплантированных атомов, которое можно оценить следующим образом:

$$N(x) = \frac{\Phi}{\sqrt{2\pi(\Delta R_p^2 + 2Dt)}} \exp\left(-\frac{(x - \langle R_p \rangle)^2}{2(\Delta R_p^2 + 2Dt)}\right), \quad (2.9)$$

где  $D$  – коэффициент термической диффузии,  $t$  – длительность отжига.

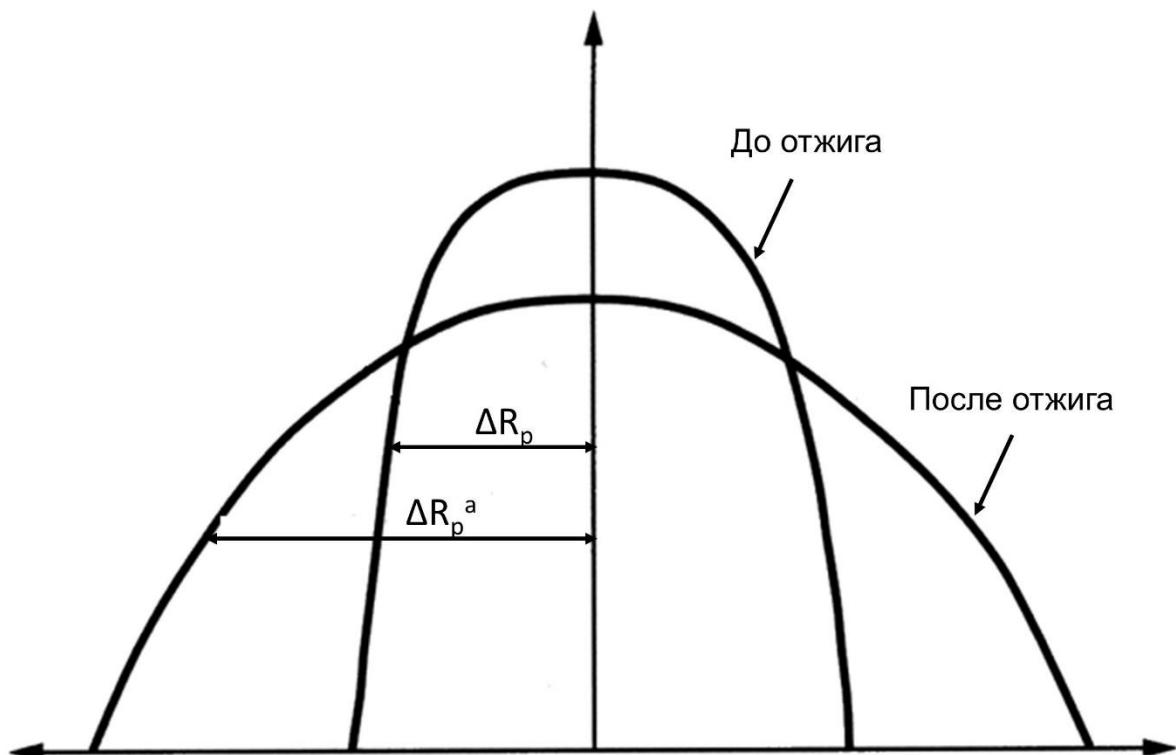


Рис.5. Изменение профиля распределения имплантированных атомов вследствие термической диффузии.

#### 4. Концентрация носителей заряда в полупроводнике

Полупроводник называется собственным, если в нем отсутствуют донорные и акцепторные примеси. В этом случае электроны появляются в зоне проводимости из валентной зоны только за счет энергии тепловых флуктуаций (рис. 6) [6].

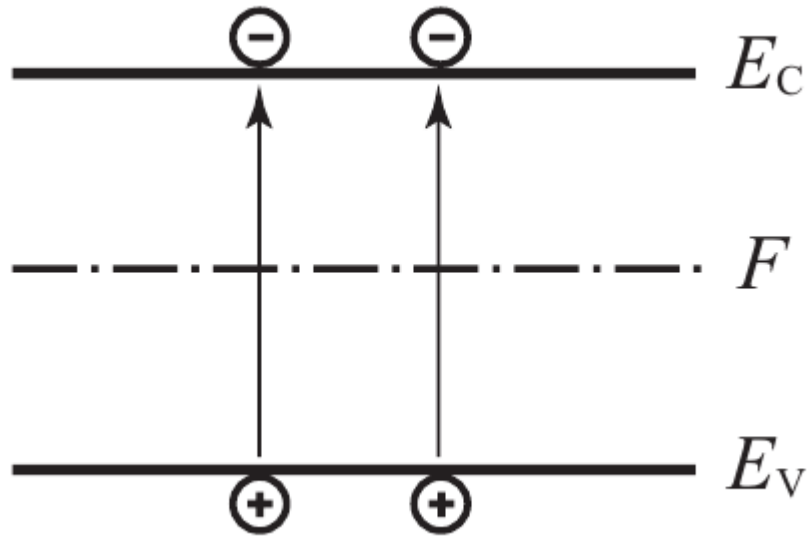


Рис.6. Зонная диаграмма собственного полупроводника [6].

При  $n_0 = p_0$  концентрация собственных носителей заряда  $n_i$ :

$$n_0 = p_0 = n_i = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{E_g}{2kT}}, \quad (2.10)$$

где  $n_0$  и  $p_0$  - концентрации свободных электронов и дырок, в равновесном состоянии, при отсутствии внешних воздействий,  $N_c$  и  $N_v$  - эффективные плотности состояний в зоне проводимости и валентной зоне, соответственно,  $E_g$  - ширина запрещенной зоны. Таким образом, концентрация собственных носителей определяется в основном температурой и шириной запрещенной зоны полупроводника.

Для полупроводников в тепловом равновесии справедлив закон действующих масс:

$$n_0 p_0 = n_i^2 \quad (2.11)$$

При введении в полупроводник легирующей примеси в запрещенной зоне полупроводника создаются дополнительные примесные уровни энергии. Уровни донорной примеси находятся вблизи дна зоны проводимости, энергия ионизации таких уровней составляет порядка нескольких десятков

миллиэлектронвольт. При комнатной температуре практически все атомы примеси оказываются ионизованными, отдавая электрон в зону проводимости (рис. 7а). Основными носителями заряда в таком полупроводнике являются электроны, полупроводник называется полупроводником *n*-типа.

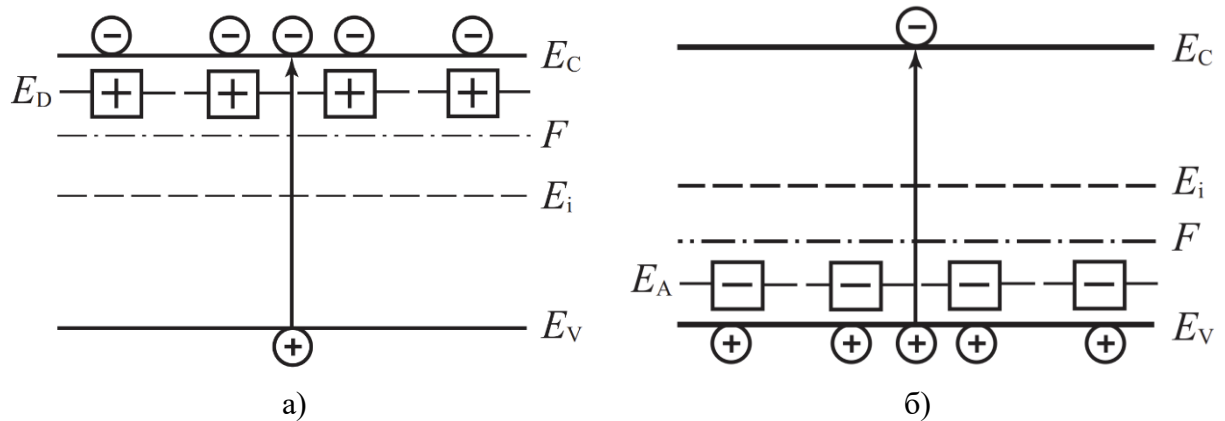


Рис.7. Зонная диаграмма примесного полупроводника а) *n*-типа, б) *p*-типа [6].

Так как концентрация примеси много больше концентрации собственных носителей заряда, и примесь полностью ионизована, то при концентрации донорной примеси, равной  $N_D$ :

$$n_0 = N_D \quad (2.12)$$

$$p_0 = \frac{n_i^2}{N_D} \quad (2.13)$$

Аналогично для легирования акцепторами с концентрацией  $N_A$ .

В случае акцепторной примеси примесные уровни расположены вблизи потолка валентной зоны. При ионизации атомов эти уровни заполняются электронами из валентной зоны, в которой образуются дырки (рис. 7б). Такой полупроводник называется полупроводником *p*-типа, основными носителями заряда в нём являются дырки. Рассуждения относительно концентрации основных и неосновных носителей аналогичны случаю донорной примеси.

## Модель бинарных столкновений

В рамках приближения бинарных столкновений (binary collision approximation, BSA) движение быстрого атома в твёрдом теле описывается как последовательность асимптотических траекторий между парными столкновениями. Обычно парные столкновения считаются упругими, и такой подход имитирует ядерное (упругое) рассеяние и торможение иона. Электронное торможение может учитываться либо нелокально вдоль свободных пробегов  $\lambda_c$ , основываясь преимущественно на полуэмпирических формулах, либо локально согласно различным моделям неупругого взаимодействия иона с электронными оболочками атомов мишени. Зачастую моделирование на основе приближения бинарных столкновений называют методом Монте-Карло из-за случайного характера некоторых внутренних переменных величин.

Для моделирования взаимодействия быстрых ионов с аморфным веществом наиболее популярным и применяемым кодом является TRIM (Transport of Ions in Matter). В рамках этого кода мишень рассматривается как аморфное вещество, которое характеризуется фиксированной длиной свободного пробега иона, равной среднему расстоянию между атомами в твёрдом теле:  $\lambda_c = n^{-\frac{1}{3}}$ . Каждый новый атом, участвующий в столкновении, выбирается внутри окружности вокруг асимптотической траектории с радиусом (не очень понятное предложение, что такое вокруг траектории в данном контексте), равным максимальному прицельному параметру  $p_{max} = \sqrt{\frac{\lambda_c}{\pi n}}$ . Таким образом,  $p_{max}$  определяет цилиндр длиной  $\lambda_c$ , содержащий в среднем один атом мишени, что отражает тот факт, что в одном столкновении участвует один атом мишени. Прицельный параметр в каждом столкновении выбирается случайным образом на основе случайного числа  $r_p \in [0,1]$  таким образом, что  $p_{max} = p\sqrt{r_p}$ . Другое случайное число  $r_\varphi$  задаёт азимутальный угол рассеяния:  $\varphi = 2\pi r_\varphi$ .

Полярный угол рассеяния  $\vartheta$  определяется из решения классической задачи двух тел:

$$\vartheta = \pi - 2p \int_0^{R_{min}^{-1}} \frac{d\left(\frac{1}{R}\right)}{\sqrt{1 - \frac{V(R)}{E_c} - \frac{p^2}{R^2}}} \quad (3.1)$$

В качестве потенциала межатомного взаимодействия используется кулоновский потенциал с универсальной функцией экранировки Ziegler – Biersack – Littmark (ZBL):

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Phi(x), \quad (3.2)$$

где  $x = \frac{r}{a_u}$ ,  $a_u = \frac{0,4685}{Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23}}$ ,

$$\Phi(x) = 0,1818e^{-3,2x} + 0,5099e^{-0,9423x} + 0,2802e^{-0,4029x} + 0,02817e^{-0,2016x}$$

Для ускорения вычислений TRIM не вычисляет интеграл в выражении для полярного угла рассеяния каждый раз, а использует аналитическое приближение, которое хорошо воспроизводит результаты точного интегрирования. Электронные потери энергии учитываются нелокальным образом на участках между столкновениями следующим образом:

$$T_{e,nl} = nS_e(\lambda_c - \tau), \quad (3.3)$$

$$\tau = p \operatorname{tg} \frac{\vartheta}{2}, \quad (3.4)$$

где  $S_e$  – неупругие потери частицы при текущей энергии.

Также, в области низких энергий TRIM может использовать полуэмпирическую формулу Оуэна – Робинсона для описания локальных электронных потерь при каждом соударении:

$$T_e(E, P) = \frac{c_1^2}{2\pi a^2} \exp\left(-\frac{c_1}{a} R_{min}(p)\right) k_e \sqrt{E}, \quad (3.5)$$

Состояние частицы после столкновения описывается пространственными координатами  $(x_i, y_i, z_i)$ , азимутальным и полярным углами  $(\alpha_i, \beta_i)$  и энергией  $E_i$ . В случае, если в результате рассеяния атом отдачи получает энергию  $T$ , превышающую пороговую энергию смещения  $U_b$  вещества мишени, то этот атом отдачи считается движущимся в мишени с начальной энергией  $E_0 = T - U_b$ , и его состояние также начинает отслеживаться. Траектории отслеживаются до тех пор, пока энергия соответствующей частицы не станет ниже энергии отсечки  $U_{cut}$ , либо частица не достигнет поверхности мишени.

В итоге компьютер прослеживает траекторию каждого упавшего иона, последовательно решая задачу о столкновении двух заряженных частиц. При этом каждый раз регистрируются следующее: потеря энергии на участке свободного пробега, потеря энергии при столкновении с атомом мишени, угол отклонения от первоначального направления, вылет атома мишени из узла (если энергия отдачи больше энергии смещения). Затем ситуация разыгрывается заново с учетом произошедшего столкновения. В качестве критерия остановки обычно полагают условие: остаточная кинетическая энергия движущегося иона не превышает энергию смещения атома мишени. На этом этапе компьютер фиксирует координаты иона.

### Упражнения

Перед выполнением упражнений необходимо создать папку для сохранения результатов моделирования. Откройте Проводник, зайдите в каталог `C:\Implantation\`, создайте в нём папку с текущей датой (если она ещё не создана), внутри которой создайте папку с Вашей фамилией. Используйте только цифры и латинские символы! Например:

`C:\Implantation\15.01.2026\Ivanov`

#### Упражнение 1. Оценка профилей залегания имплантированной примеси.

1. Оценить средний проецированный пробег и его дисперсию по формулам (2.5), (2.6), (2.8) для ионов бора и фосфора в кремнии при энергиях ионного пучка 40, 100 и 500 кэВ.

2. Сравнить полученные значения с данными, полученными с помощью TRIM. Для этого:
- 2.1. В главном окне SRIM нажать кнопку **Stopping / Range Tables**.



- 2.2. В открывшемся окне в разделе **Ion** выбрать требуемый сорт ионов, ввести диапазон энергий 40 – 500 кэВ. В разделе **Target** выбрать кремний.



2.3. Нажать кнопку **Calculate table**. В открывшемся диалоговом окне нажать **ОК**.

2.4. Изучить полученную таблицу. Выбрать строки, для которых в столбце Ion Energy значения соответствуют заданным в упражнении энергиям ионов. Сравнить значения среднего проективного пробега, приведенные в столбце *Projected Range* с оценкой по формуле (2.5). Сравнить значения полуширины распределения, приведенные в столбце *Longitudinal Stragglng* с оценками, полученными с помощью формулы (2.8).

## **Упражнение 2. Моделирование профилей внедренной примеси и расчёт электрофизических характеристик модифицированного слоя.**

1. С помощью программы TRIM провести расчёт профилей имплантированных ионов фосфора и бора с энергиями 40, 100 и 500 кэВ в кремний. Для этого:

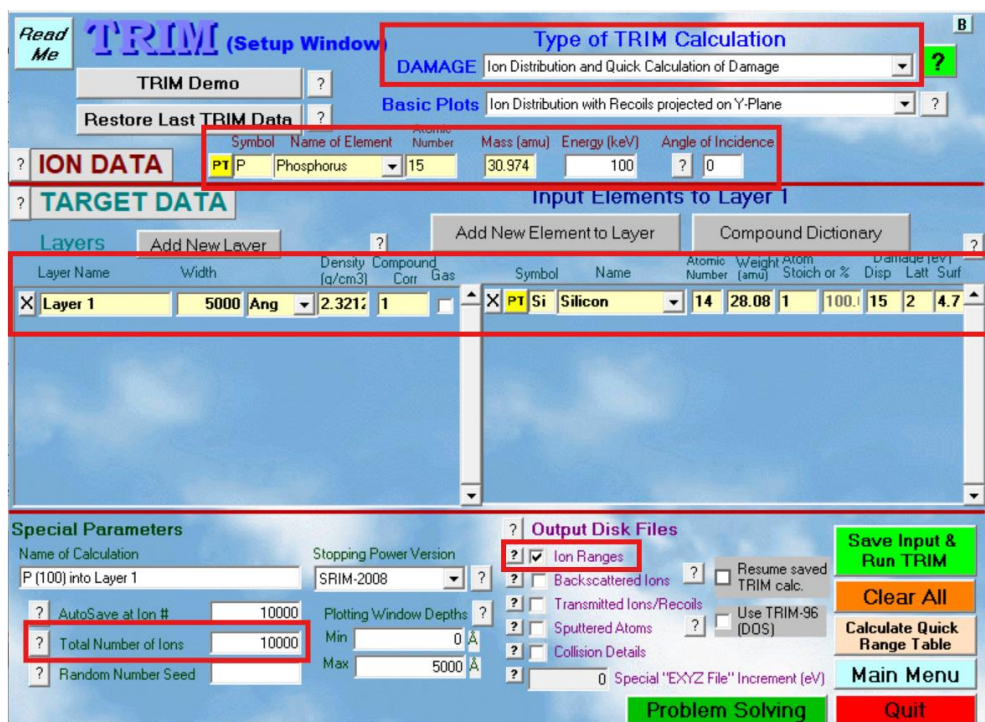
1.1. В созданном в начале задачи каталоге создать папку для каждой комбинации типа и энергии имплантируемых ионов. Использовать только латинские символы и цифры. Например:

C:\Implantation\15.01.2026\Ivanov\P40keV

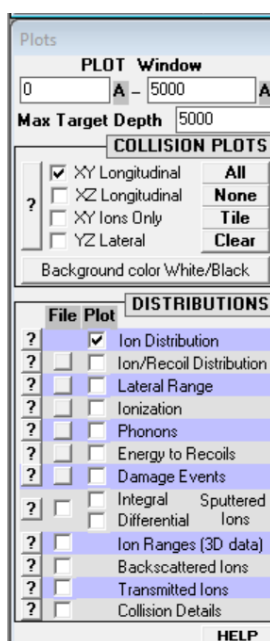
1.2. В главном окне SRIM нажать кнопку **TRIM Calculation**.



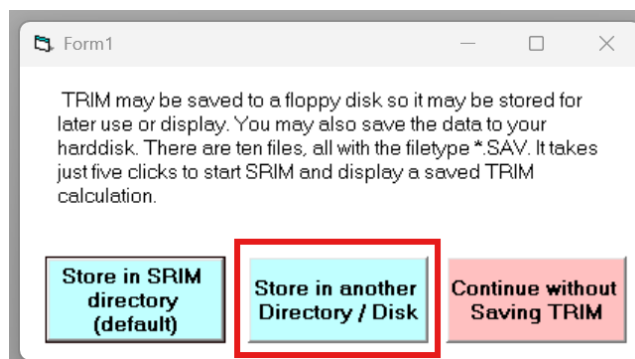
- 1.3. В открывшемся окне в разделе **Type of TRIM Calculation** в выпадающем меню **DAMAGE** выбрать пункт «*Ion Distribution and Quick Calculation of Damage*».
- 1.4. В разделе **ION DATA** выбрать требуемый тип и энергию ионов. Угол падения оставить равным 0 градусов, что соответствует облучению по нормали к поверхности.
- 1.5. В разделе **TARGET DATA** выбрать сорт атомов мишени. Толщину слоя (поле **Width**) установить равной удвоенной величине пробега для данной комбинации энергии и сорта имплантируемых ионов, рассчитанной в упражнении 1.
- 1.6. В разделе **Output Disk Files** отметить пункт *Ion Ranges*. В поле **Total Number Of Atoms** ввести значение 50000.
- 1.7. Нажать кнопку **Save Input & Run TRIM**.



1.8.В открывшемся окне наблюдать за ходом моделирования. Отмечая различные пункты в разделе **Plots** возможно в режиме реального времени отслеживать траектории имплантируемых ионов и распределения различных величин (подробнее см. описание программы TRIM). Важно отметить, что каждый открытый график замедляет процесс моделирования, поэтому для максимального ускорения расчётов можно закрыть все окна графиков.



1.9. По окончании расчёта появится диалоговое окно «**End of calculation**», предлагающее сохранить результат, в котором необходимо нажать кнопку **Yes**. В следующем открывшемся окне нажать **Store in another Directory / Disk**. Для сохранения файлов выберите созданную в начале выполнения упражнения папку.



- 1.10. Сохраните профиль распределения внедренной примеси, нажав на серый квадрат в разделе **DISTRIBUTIONS** в столбце **File** напротив пункта **Ion/Recoil Distribution**.
2. По данным из файла RANGE.txt построить распределения внедренной примеси по глубине. Аппроксимировать полученный профиль распределением Гаусса, сделать выводы о корректности такой аппроксимации. Определить значение среднего проективного пробега и его дисперсии, сравнить с результатами упражнения 1. Обратите внимание, что размерность числа имплантированных атомов в программе TRIM составляет  $(\text{атом}/\text{см}^3)/(\text{атом}/\text{см}^2)$ . Таким образом, умножив полученную величину на флюенс облучения, можно получить объёмную концентрацию атомов на данной глубине мишени.
  3. Рассчитать среднюю концентрацию примеси в слое в пределах полуширины распределения внедренных ионов. Пренебрегая изменением распределения примеси в образце в процессе термической активации, определить тип проводимости в указанной области, рассчитать среднюю

концентрацию основных и неосновных носителей заряда для флюенсов облучения, равных:  $\Phi_1 = 10^{13} \text{ см}^{-2}$ ,  $\Phi_2 = 10^{14} \text{ см}^{-2}$  и  $\Phi_3 = 10^{15} \text{ см}^{-2}$ .

4. Пренебрегая уширением профиля внедренной примеси в процессе отжига, проводимого после ионной имплантации, рассчитать проводимость и удельное сопротивление указанного слоя при комнатной температуре и данных флюенсах облучения по формулам:

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{\sigma_n + \sigma_p};$$

$$\sigma_n = e\mu_n n$$

$$\sigma_p = e\mu_p p$$

Подвижность электронов и дырок в кремнии при комнатной температуре:  $\mu_n = 1450 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$ ,  $\mu_p = 450 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$ . Удельное сопротивление собственного кремния при комнатной температуре  $\rho = 2,3 \cdot 10^5 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ .

## Литература

- [1] Титов. Внедрение быстрых ионов в монокристаллы. Москва, 1978.
- [2] [Hofker, W. K., Oosthoek, D. P., Koeman, N. J., & M. de grefte, H. A. (1975). Concentration profiles of boron implantations in amorphous and polycrystalline silicon. *Radiation Effects*, 24(4), 223–231.
- [3] Х. Риссел, И. Руге. Ионная имплантация. - М.: Наука, 1983.
- [4] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Механика. - М.: Наука, 1975.
- [5] J. Lindhard, M. Scharff, H. E. Schiott, *Mat. Fys. Medd . Dan. Vid. Selsk.* **33**, no.14 (1963) 1-42.
- [6] В.А. Гуртов. Твердотельная электроника. – М.: Техносфера, 2008.