

## ПРОФИЛИ ВНЕДРЕНИЯ, СОЗДАВАЕМЫЕ ИОНАМИ В УСЛОВИЯХ КАНАЛИРОВАНИЯ

С.И. Матюхин

Орловский государственный технический университет  
302020, г.Орёл, Наугорское шоссе, 29; e-mail: sim1@mail.ru

Получены аналитические выражения для профилей внедрения, которые создаются ионами, инжектированными в кристаллы в условиях каналирования, и для доли ионов, остановившихся и не остановившихся на заданной глубине проникновения. Показано, что полученные формулы демонстрируют удовлетворительное согласие с экспериментом и могут быть использованы при решении задачи управления глубиной и формой создаваемых ионами профилей внедрения и повреждений, а также для экспрессного определения по экспериментальным данным длины деканалирования ионов и вероятности их захвата в режим каналирования.

**Ключевые слова:** ионная имплантация, эффект каналирования, профили внедрения.

### Введение

В комплексе современных высоких технологий важную роль играет задача управления глубиной и формой создаваемых ионами профилей внедрения и повреждений. Такая задача возникает, например, при разработке новых ядерно-физических методов модификации электрических, физико-химических и механических свойств материалов в современном материаловедении, при конструировании полупроводниковых структур и приборов в современной микро- и нанозлектронике, а также при решении проблемы радиационных повреждений первой стенки термоядерных реакторов и конструкционных материалов в реакторах на быстрых нейтронах. При этом одним из возможных путей решения этой задачи является использование метода ионной имплантации в сочетании с эффектом каналирования, в связи с чем возникает необходимость как можно более точного определения профилей внедрения и профилей повреждений, создаваемых частицами, инжектированными в кристаллы в условиях каналирования.

В разное время к расчету этих профилей обращались различные авторы [1–5]. Однако в работах [1, 2] для этого использовались функции и величины, полученные путем решения проблемы деканалирования ионов в приближении монотонного набора их поперечных энергий, а в работах [3, 4], несмотря на физическую корректность предлагаемых в них методов, при вычислении профилей внедрения был сделан ряд математических ошибок, что, по-видимому, заставило авторов работы [5] обратиться к численным расчетам.

В настоящей работе на основе подхода, предложенного в работах [3, 4], получены аналитические выражения для профилей внедрения ионов и найдены относительные доли ионов, остановившихся и не остановившихся на заданной глубине проникновения. Показано, что полученные формулы демонстрируют удовлетворительное согласие с экспериментом и могут быть использованы как при решении задачи управления глубиной и формой создаваемых ионами профилей внедрения и повреждений, так и для экспрессного определения по экспериментальным данным длины деканалирования ионов и вероятности их захвата в режим каналирования.

### 1. Профили внедрения ионов, инжектированных в кристаллы в условиях каналирования

В самом общем случае частица с начальной энергией  $E_0$ , инжектированная в кристалл в условиях каналирования, внедряется на глубине  $z$  следующим образом. Двига-



ясь в канале, она достигает глубины  $z' \leq z$ , на которой деканализирует, имея энергию  $E(z')$ , после чего достигает глубины  $z$ , двигаясь в хаотическом режиме. Из этого вытекает следующее общее выражение для профиля внедрения  $f(z)$  ионов, инжектированных в кристалл в условиях каналирования [3]:

$$f(z) = \int_0^z f_{ch}(z', E(z')) f_r(z - z', E(z - z')) dz', \quad (1)$$

где  $f_{ch}(z, E)$  – плотность вероятности того, что частица, инжектированная в канал с энергией  $E$  в точке  $z = 0$ , деканализирует на глубине  $z$ , а  $f_r(z, E)$  – профиль внедрения частиц, стартовавших с энергией  $E$  на глубине  $z = 0$  в хаотическом режиме.

В большинстве практически важных случаев функцию  $f_r(z, E)$  можно представить в гауссовом виде (см., например, [6–8]):

$$f_r(z, E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2(E)}} \exp\left\{-\frac{[z - R_p(E)]^2}{2\sigma^2(E)}\right\}, \quad (2)$$

где  $R_p(E)$  – проективный пробег, а  $\sigma(E)$  – страгглинг.

Если страгглингом частиц можно пренебречь ( $\sigma \ll R_p$ ), эта функция приобретает следующую, наиболее простую форму:  $f_r(z, E) \approx \delta(z - R_p(E))$ .

Что касается функции  $f_{ch}(z, E)$ , то она, по сути, представляет собой функцию распределения глубин деканализирования ионов [9], и может быть представлена в виде:

$$f_{ch}(z, E) = [1 - P_{ch}(0)] \delta(z) + \frac{P_{ch}(0)}{R_{ch}(E(z))} \exp\left(-\int_0^z \frac{dz'}{R_{ch}(E(z'))}\right) \theta(z_c - z) + P_{ch}(0) \exp\left(-\int_0^z \frac{dz'}{R_{ch}(E(z'))}\right) \delta(z_c - z), \quad (3)$$

где  $P_{ch}(z)$  – вероятность того, что частица останется в канале на глубине  $z$ ,  $R_{ch}(E)$  – длина деканализирования ионов, а  $\theta(x)$  – ступенчатая функция Хевисайда.

Последнее слагаемое в формуле (3) учитывает тот факт, что частицы, которые, двигаясь в режиме каналирования, снизили свою энергию до критического значения  $E_c$  [10], интенсивно деканализируют на глубине  $z_c$ , определяемой соотношением:

$$z_c = \int_{E_0}^{E_c} \left(\frac{dE}{dz}\right)^{-1} dE, \quad (4)$$

где  $dE/dz$  – полные потери энергии каналированного иона на единице пути. Второе слагаемое отвечает частицам, которые переходят в неориентированную (хаотическую) фракцию на глубине  $z < z_c$ . Наконец, первое – частицам, которые деканализируют сразу на входе в каналы.

Функции  $E(z)$ , которые входят в выражения (1) – (3), должны быть получены путем решения относительно  $E$  двух уравнений типа (4) (для частиц, движущихся в каналированном и хаотическом режиме), в которых произведена замена:  $z_c \rightarrow z$ ,  $E_c \rightarrow E$ . При этом для каналированных частиц и для частиц, движущихся в хаотическом режиме, должны быть использованы различные выражения для потерь энергии  $dE/dz$ . Поскольку универсальных формул для этих потерь, справедливых во всем диапазоне энергий, не существует, в самом общем случае профили внедрения ионов (1) могут быть найдены только численными методами. Однако аналитические выражения для этих функций могут быть получены при следующем упрощающем допущении [3].

В силу экспоненциального уменьшения с глубиной числа оставшихся в канале частиц, можно считать, что все ионы, покинувшие канал на глубине  $0 \leq z < z_c$ , покидают его с энергией  $E \approx E_0$ , а остальные – с энергией  $E \approx E_c$ .

В этом случае из формул (1), (2) и (3) вытекает следующее аналитическое выражение для профиля внедрения  $f(z)$ :

$$\begin{aligned}
 f(z) = N^{-1} & \left[ \frac{1 - P_{ch}(0)}{\sqrt{2\pi\sigma^2(E_0)}} \exp\left(-\frac{[z - R_p(E_0)]^2}{2\sigma^2(E_0)}\right) + \frac{P_{ch}(0)}{2R_{ch}(E_0)} \exp\left(-\frac{z - R_p(E_0)}{R_{ch}(E_0)} + \frac{\sigma^2(E_0)}{2R_{ch}^2(E_0)}\right) \right] \times \\
 & \times \left\{ \theta(z_c - z) \operatorname{erf}\left(\frac{R_p(E_0) + \sigma^2(E_0)/R_{ch}(E_0)}{\sqrt{2\sigma^2(E_0)}}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{z - R_p(E_0) - \sigma^2(E_0)/R_{ch}(E_0)}{\sqrt{2\sigma^2(E_0)}}\right) + \right. \\
 & \left. + \theta(z - z_c) \operatorname{erf}\left(\frac{z_c + R_p(E_0) + \sigma^2(E_0)/R_{ch}(E_0) - z}{\sqrt{2\sigma^2(E_0)}}\right) \right\} + \\
 & + \frac{P_{ch}(0)}{\sqrt{2\pi\sigma^2(E_c)}} \exp\left(-\frac{z_c}{R_{ch}(E_0)} - \frac{[z - z_c - R_p(E_c)]^2}{2\sigma^2(E_c)}\right) \theta(z - z_c),
 \end{aligned} \quad (5)$$

где  $\operatorname{erf}(x)$  – интеграл ошибок, а  $N^{-1}$  – нормировочный множитель, определяемый из условия нормировки функции  $f(z)$  на единицу.

Если страгглингом частиц можно пренебречь ( $\sigma \ll R_p$ ),  $f(z)$  равна

$$\begin{aligned}
 f(z) \approx N^{-1} & \left\{ [1 - P_{ch}(0)] \delta(z - R_p(E_0)) + \right. \\
 & + \frac{P_{ch}(0)}{R_{ch}(E_0)} \exp\left[-\frac{z - R_p(E_0)}{R_{ch}(E_0)}\right] \theta(z - R_p(E_0)) + \\
 & \left. + P_{ch}(0) \exp\left[-\frac{z_c}{R_{ch}(E_0)}\right] \delta(z - z_c - R_p(E_c)) \right\}.
 \end{aligned} \quad (6)$$

Отсюда, учитывая, что  $R_{ch} \ll z_c$ , находим:

$$N \approx 1 + P_{ch}(0) \exp\left(-\frac{z_c}{R_{ch}(E_0)}\right) \approx 1. \quad (7)$$

Как показывает выражение (6), функция  $f(z)$  имеет два максимума, величина и положение которых определены практически с нулевой погрешностью, поскольку эти максимумы образуются частицами, покидающими канал в точках  $z = 0$  и  $z = z_c$  с энергиями, равными, соответственно,  $E_0$  и  $E_c$ . Что касается значений функции  $f(z)$  в интервале  $R_p(E_0) < z < R_p(E_c) + z_c$ , то погрешность  $\delta$  выражения (5) по отношению к точной формуле (1) не превышает в нем значения [3]

$$\delta \approx \exp\left[-\frac{R_p(E_0) - R_p(E_c)}{2R_{ch}(E_0)}\right], \quad (8)$$

и поскольку всегда имеет место неравенство  $R_p(E) \ll R_{ch}(E)$ , величина  $\delta \ll 1$ .

В качестве примера на рис. 1 изображены рассчитанные по формуле (5) профили внедрения ионов криптона с энергией 40, 80 и 120 кэВ, инжектированных в условиях каналирования в направлении  $\langle 100 \rangle$  монокристалла алюминия. Сравнение этих расчетов с экспериментальными данными [11] будет произведено ниже, на рис. 2.



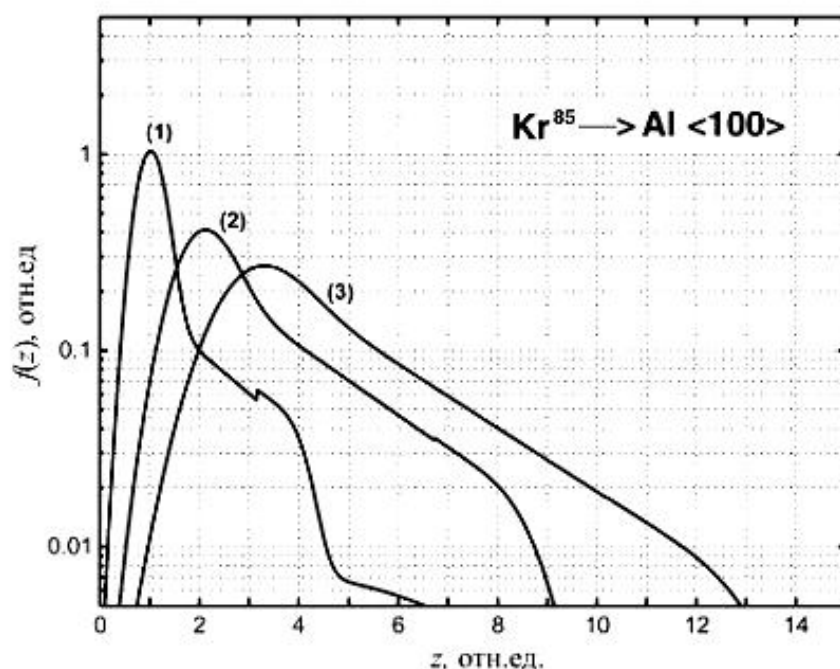


Рис. 1. Профили внедрения ионов  $Kr^{85}$  с энергией 40, 80 и 120 кэВ, инжектированных в условиях каналирования в направлении  $\langle 100 \rangle$  монокристалла алюминия. Кривая (1) соответствует энергии ионов, равной 40 кэВ, (2) – 80 кэВ, (3) – 120 кэВ. На кривой (1) отчетливо виден второй максимум, образованный частицами, покидающими каналы на глубине  $z_c \approx 79$  нм

## 2. Доля ионов, остановившихся и не остановившихся на заданной глубине проникновения

Зная функцию  $f(z)$ , определяющую профиль внедренных ионов, в силу ее нормировки легко найти долю частиц  $F(z)$ , инжектированных в кристаллы в условиях каналирования и остановившихся на глубине проникновения, меньшей или равной  $z$ :

$$F(z) = \int_0^z f(z') dz'. \quad (9)$$

Отсюда полная вероятность  $P(z)$  того, что инжектированная в кристалл частица достигнет глубины, большей, чем  $z$  (то есть не остановится на глубине  $z$ ), равна

$$P(z) = 1 - F(z) = 1 - \int_0^z f(z') dz'. \quad (10)$$

Считая, что профиль внедренных ионов  $f(z)$  определяется выражением (5), из формулы (10) находим следующее громоздкое, но достаточно точное аналитическое выражение для доли ионов, не остановившихся на заданной глубине проникновения:

$$P(z) = 1 - N^{-1} \left\{ \frac{1 - P_{ch}(0)}{2} \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{R_p(E_0)}{\sqrt{2\sigma^2(E_0)}} \right) + \operatorname{erf} \left( \frac{z - R_p(E_0)}{\sqrt{2\sigma^2(E_0)}} \right) \right] + \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{P_{ch}(0)}{2} \exp\left(\frac{\sigma^2(E_0)}{2R_{ch}^2(E_0)}\right) \left[ 1 + \operatorname{erf}\left(\frac{R_p(E_0) + \sigma^2(E_0)/R_{ch}(E_0)}{\sqrt{2\sigma^2(E_0)}}\right) \right] \times \\
& \times \left[ \exp\left(-\frac{\sigma(E_0)}{\sqrt{2}R_{ch}(E_0)} - \frac{\sigma^2(E_0)}{R_{ch}^2(E_0)}\right) - \exp\left(-\frac{z - R_p(E_0)}{R_{ch}(E_0)}\right) \right] \theta(z - R_p(E_0) - \sigma(E_0)) + \\
& + \left[ \exp\left(-\frac{z_c}{R_{ch}(E_0)}\right) - \exp\left(-\frac{z_c - \sigma(E_0)/\sqrt{2} + \sigma^2(E_0)/R_{ch}(E_0)}{R_{ch}(E_0)}\right) \right] \theta(z - z_c) \Big\} + \\
& + \frac{P_{ch}(0)}{2} \exp\left(-\frac{z_c}{R_{ch}(E_0)}\right) \left[ \operatorname{erf}\left(\frac{z - R_p(E_c) - z_c}{\sqrt{2\sigma^2(E_c)}}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{R_p(E_c)}{\sqrt{2\sigma^2(E_c)}}\right) \right] \theta(z - z_c) \Big\}.
\end{aligned} \tag{11}$$

При  $\sigma \ll R_p$  это выражение переходит в формулу:

$$P(z) \approx \begin{cases} 1 & \text{при } z < R_p(E_0), \\ P_{ch}(0) \exp\left(-\frac{z - R_p(E_0)}{R_{ch}(E_0)}\right) & \text{при } R_p(E_0) \leq z < z_c + R_p(E_c), \\ P_{ch}(0) \exp\left(-\frac{z - R_p(E_0)}{R_{ch}(E_0)}\right) - P_{ch}(0) \exp\left(-\frac{z_c}{R_{ch}(E_0)}\right) & \text{при } z \geq z_c + R_p(E_c), \end{cases} \tag{12}$$

которую можно также получить из (10), считая, что профиль внедренных ионов  $f(z)$  определяется выражениями (6) и (7).

Для легких ионов, торможением которых можно пренебречь, глубина  $z_c$ , как правило, много больше их длины деканализации  $R_{ch}$ . При этом из (12) вытекает следующая простейшая формула для  $P(z)$  [4]:

$$P(z) \approx \begin{cases} 1 & \text{при } z < R_p(E_0), \\ P_{ch}(0) \exp\left(-\frac{z - R_p(E_0)}{R_{ch}(E_0)}\right) & \text{при } z \geq R_p(E_0). \end{cases} \tag{13}$$

### Заключение

На рис. 2 проведено сравнение теоретических расчетов, произведенных по формулам (11) и (13), со ставшими классическими экспериментальными данными [11] по проникновению ионов  $Kr^{85}$  с энергией 40 кэВ вдоль главных кристаллографических направлений монокристалла алюминия. Как показывает этот рисунок, построенная теория демонстрирует не только качественное, но и удовлетворительное количественное согласие с экспериментом. При этом следует обратить внимание на то, что качественное поведение функции  $P(z)$  хорошо описывают и штриховые линии, соответствующие элементарному выражению (13).

Из рисунка видно, что это выражение может быть использовано для экспрессного определения по экспериментальным данным длины деканализации ионов и вероятности  $P_{ch}(0)$  их захвата в режим каналирования. Однако формула (13) не учитывает деканализации частиц, энергия которых снизилась до критического значения  $E_c$ , и не



воспроизводит реальных профилей внедрения  $f(z)$ , которые имеют форму, изображенную на рис. 1.

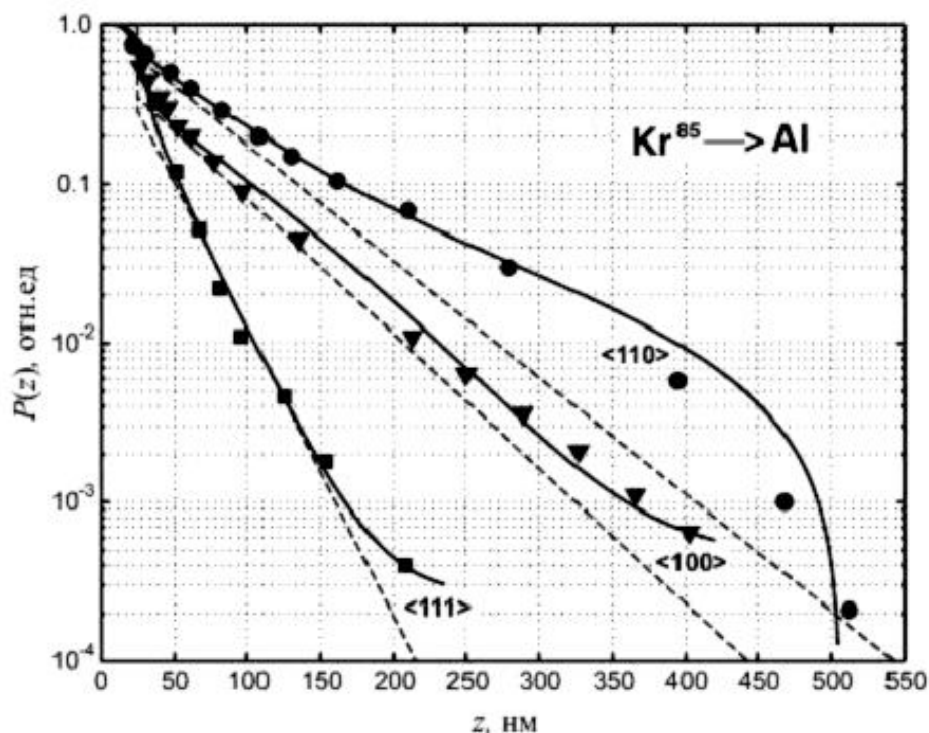


Рис. 2. Проникновение ионов  $Kr^{65}$  с энергией 40 кэВ вдоль главных кристаллографических направлений монокристалла алюминия. Сплошные кривые – расчеты по формуле (11), маркеры – экспериментальные данные [11]. Штриховкой изображены кривые, рассчитанные по формуле (13)

#### Литература

1. Ю.В. Мартыненко. Распределение по глубине проникновения каналированных частиц // ФТТ. – 1971. – Т.13. №9. – С.2580-2586.
2. М.А. Кумахов, В.А. Муралев, В.А. Симонов. Пространственное распределение внедренных ионов и радиационных дефектов при учете эффекта каналирования // Труды IV Всесоюзного совещ. по физике взаимодействия заряженных частиц с монокристаллами. – М.: Изд-во МГУ, 1973. С.118–130.
3. В.В. Рожков. Профили внедрения частиц, инжектированных в кристалл в условиях каналирования // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. – 1980. – Вып.2 (13). – С.87-90.
4. В.В. Рожков, П.Б. Руткевич. Теория теплового деканалирования из аксиальных каналов // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. – 1981. – Вып.2 (16). – С.42-49.
5. М.И. Братченко, С.В. Дюльдя, А.С. Бакай. Теория и моделирование имплантации ионов бора в монокристаллы кремния // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Вакуум, чистые материалы, сверхпроводники. – 2006. – Вып.1 (15). – С.179-183.
6. В.С. Галишев. Вопросы теории многократного рассеяния частиц. – М.: Атомиздат, 1972.
7. Ю.В. Готт. Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях. – М.: Атомиздат, 1978.
8. Н.П. Калашников, В.С. Ремизович, М.И. Рязанов. Столкновения быстрых заряженных частиц в твердых телах. – М.: Атомиздат, 1980.
9. V.V. Rozhkov. Theory of Dechanneling // Phys. Stat. Sol. (b). – 1979. – V.96. – P.463-468.
10. С.И. Матюхин. Критические параметры каналирования // ЖТФ. – 2008. – Т. 78. – Вып.12. – С.47-53.



11. G.R. Piercy, M. McCargo, F. Brown, J.A. Davies. Experimental evidence for the channeling of heavy ions in monocrystalline aluminium // *Canad. J. Phys.* – 1964. – V.42. № 6-7. – P.1116-1134.

## IMPLANTATION PROFILES PRODUCED BY CHANNELING IONS

**S.I. Matyukhin**

Orel State Technical University  
Naugorskoe shosse, 29, Orel, 302020, Russia; e-mail: [sim1@mail.ru](mailto:sim1@mail.ru)

The analytical expressions for implantation profiles produced by channeling ions and parts of the ions stopped and not stopped on given depth of penetration are obtained. It's shown, that the obtained formulas are demonstrated the satisfactory agreement with experimental data and can be used both at solution of control problem for depth and shape of ion implantation and damage profiles, and for express definition of dechanneling length and probability of ion invading in channeling mode on experimental data.

**Key words:** ion implantation, channeling, implantation and damage profiles.