Приложение 3

<u>Образец оформления лабораторной работы</u>

Министерство образования и науки РФ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Омский государственный технический университет»

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 1

РАСЧЕТ ПРОБЕГОВ ИОНОВ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

Выполнил: Глуховеря Е. Г.

Группа: НИм-141

Проверил: Блесман А. И.

Омск

Лабораторная работа № 1

РАСЧЕТ ПРОБЕГОВ ИОНОВ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

Цель работы: Рассчитать пробег ионов твердом теле при ионной имплантации.

Краткие теоретические сведения

Метод ионной имплантации (ИИ) заключается в бомбардировке мишени ионами, ускоренными до энергий порядка 10^3… 10^6 эВ, в результате чего внедряются в неё, создавая в приповерхностном слое определённоё распределение концентрации примесей. Глубина проникновения ионов зависит от энергии, а также материала мишени. Концентрация легирующей примеси в мишени зависит от количества ионов данной энергии бомбардирующих единицу площади – дозы имплантации.

Основные характеристики ИИ – глубина внедрения, доза имплантации. Процесс может происходить как с напуском газа, так без напуска газа при давлении от 1,33 Па и ниже. Имплантируемый материал (материал катода) выбивается из него, ионизируется и за счёт воздействия высокого напряжения внедряется в мишень.

Метод ионной имплантации позволяет существенно изменить электрические, химические, оптические, механические, эмиссионные свойства материалов. В виду того, что процесс ионной имплантации неравновесный, можно получать сплавы и соединения которые нельзя получить обычными методами, достигнуть такой концентрации внёдрённой примеси, которая превышает пределы растворимости.

2. Расчёт параметров процесса ионной имплантации.

Основные допущения при расчётах [1].

1. Вещество, с которым взаимодействует ион, является однородным и изотропным, а атомы в нём расположены хаотически (мишени аморфные).
2. Упругие и неупругие взаимодействия происходят независимо друг от друга.
3. Упругие и неупругие взаимодействия рассматриваются на основе статистической модели атома Томаса – Ферми, при этом в качестве функции экранирования в потенциале взаимодействия используется Φ:

$$\Phi = \frac{z_1 z_2 e^2}{r} f(r/a) \qquad (1)$$

где z_1 – порядковый номер имплантируемого иона; z_2 – порядковый номер атома мишени; $f(r/a) = a/2r$ – функция экранирования ядер электронами; r – максимальное расстояние, на которое сближаются частицы; a – параметр экранирования.

За основу для расчета параметра экранирования принимается выражение (2):

$$a = 0{,}885 a_0 (z_1^{2/3} + z_2^{2/3})^{-1/2} \qquad (2)$$

где a_0 = 0,0529 нм – радиус первой орбиты в атоме водорода по Бору.

Электронные потери описываются выражением $(dE/dR)_e$, эВ/см (3):

$$\left(\frac{dE}{dR}\right)_e = -2.34 \cdot 10^{23} n (z_1 + z_2) v \qquad (3)$$

где v – скорость иона (см/с); n – количество атомов в 1 см^3 мишени, определяемое по формуле (4):

$$n = \frac{N_A \rho_1}{M_1} \qquad (4)$$

где $N_A = 6.02 \cdot 10^{23} моль^{-1}$ (число Авогадро), ρ_1 – плотность, $г/см^3$; M_1 – молярная масса материала мишени, $г/моль$.

4. Считается, что упругие взаимодействия можно рассматривать как парные, не учитывая состояния внешних электронов в твёрдом теле и зарядовое состояния иона.

5. Потери энергии в каждом акте соударения предполагаются много меньшими, чем энергия иона, что позволяет использовать статистический подход к рассмотрению пробегов ионов и упрощает расчёты.

6. Функции потерь энергии иона в упругих соударениях существенно превосходят таковые для электронных.

7. При описании движения ионов в среде следует учитывать два взаимосвязанных процесса – изменение направления движения ионов (рассеяние) и изменение энергии – торможение. Пробег ионов в мишени определяется по формуле:

$$R = \frac{1}{n}\int_0^E \frac{dE}{S_n + S_e}$$

где R – проекция длинны пробега ионов в твёрдом теле, *мкм*; Е – энергия иона эВ; n – количество атомов в единице объёма, $см^{-3}$; S_n, S_e – ядерная и электронная тормозная способность, $эВ \cdot см^2$.

Ядерная и электронная тормозные способности определяются соответственно соотношениями (6) и (7):

$$S_n = -\frac{1}{n}\left(\frac{dE}{dx}\right)_n \tag{5}$$

$$S_e = -\frac{1}{n}\left(\frac{dE}{dx}\right)_e \tag{6}$$

где $\frac{dE}{dx}$ – потери энергии в слое dx, $эВ/см$.

Ядерная тормозная способность (5) в интегральной форме:

$$S_n = -\int_0^{E_{\max}} E_p d\sigma \tag{7}$$

где $d\sigma = 2\pi p dp$ – дифференциальное сечение; p – прицельное расстояние; E_p – энергия, передаваемая ионами ядрам атома.

При соударении с атомами мишени имплантируемый ион отклоняется на угол φ_0 от своего движения и передает энергию E_p столкнувшимся с ним атомом, в результате чего атом отклоняется на угол φ_1 от оси полёта иона. При изменении значений угла отклонения от 0 до π значение E_p меняется от 0 до $E_{\max}$.

$$E_{\max} = \frac{4EM_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} \tag{8}$$

где M_1 и – молярная масса мишени и M_2 катода, *г/моль*.

Расчет E_p представляет собой известную задачу механики:

$$E_p = \frac{2M_1M_2E(1-\cos\varphi)}{M_1+M_2} \tag{9}$$

где φ – угол отклонения частицы в системе отсчета центра масс.

В системе отсчета, связанной с центром масс энергия рассчитывается согласно формуле (10):

$$E_{отн} = \frac{M_2E}{M_1+M_2} \tag{10}$$

Для удобства расчётов введём безразмерные (нормированные) значения энергии (ε), пробега (ρ) и параметра расстояния (t).

$$\varepsilon = \frac{aE_{отн}}{z_1z_2e^2} = \frac{aM_2E}{z_1z_2e^2\left(M_1+M_2\right)} = C_eE \tag{11}$$

где C_e – коэффициент нормирования.

$$\rho = \frac{4R\pi a^2nM_1M_2}{\left(M_1+M_2\right)^2} = C_RR \tag{12}$$

$$t = \varepsilon^2\sin^2(\varphi/2) \tag{13}$$

Дифференциальное сечение с учётом соотношения (13) запишем в виде:

$$d\sigma = -\pi a^2\frac{dt}{2t^{3/2}}f(t^{1/2}) \tag{14}$$

Выражения (1) и (14) в большинстве случаев решаются численными методами. Перепишем уравнения (5) и (6) в нормированном виде:

$$\left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_n = S_n(\varepsilon) = \left(\frac{dE}{dR}\right)_n\cdot\frac{\varepsilon}{E}\cdot\frac{R}{\rho} \tag{15}$$

Выразим из (15) удельные потери как:

$$\left(\frac{dE}{dR}\right)_n = -nS_n = \left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_n\frac{E}{\varepsilon}\cdot\frac{\rho}{R} = \left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_n\cdot\frac{E}{C_eE}\cdot\frac{C_RR}{R} = \left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_n\cdot\frac{C_R}{C_e} \tag{16}$$

Для соотношения (16) может быть использована аналитическая аппроксимация выражения:

$$\frac{d\varepsilon}{d\rho} = \frac{A\sqrt{\varepsilon}}{B+\varepsilon} \tag{17}$$

где ε – приведённая энергия, A=0,45 , B=0,3 – коэффициенты.

В диапазоне энергий 0,05 < ε < 10 значения совпадают с вышеизложенной теорией до 10%.

Электронная тормозная способность. При неупругих столкновениях кинетическая энергия иона расходуется на электронные переходы в атомах (или между различными разрешительными зонами твёрдого тела), а также на возбуждение коллективных колебаний электронов.

Электронную тормозную способность можно выразить через дифференциальное сечение:

$$S_e = \int E_e d\sigma_e \tag{18}$$

Зависимость удельных потерь примет вид:

$$\left(\frac{dE}{dR}\right)_e = -nS_e \tag{19}$$

Вычислить дифференциальное сечение для конкретных пар «ион–твёрдое» тело очень сложно, поэтому рассмотрим только зависимость сечения торможения от энергии и вида взаимодействующих частиц. В теории О.Б. Фирсова считается, что при сближении соударяющиеся атомы образуют квазимолекулу, происходит обмен электронами. Линейную зависимость получили И. Линдхард и М. Шарф:

$$S_e(\varepsilon) = -k_e \varepsilon^{1/2} \tag{20}$$

$$k_e = 0.0793 \frac{z_1^{1/2} z_2^{1/2}}{(z_1^{2/3} + z_2^{2/3})^{3/4}} \cdot \frac{(M_1 + M_2)^{3/2}}{M_1^{3/2} M_2^{1/2}} z_1^{1/6} \tag{21}$$

где k_e – коэффициент нормирования.

Учитывая безразмерные параметры, получим выражение (22):

$$\left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_e = S_e(\varepsilon) = \left(\frac{dE}{dR}\right)_e \cdot \frac{\varepsilon}{E} \cdot \frac{R}{\rho} \tag{22}$$

В размерном виде:

$$\left(\frac{dE}{dR}\right)_e = -nS_e = \left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_e \frac{E}{\varepsilon} \cdot \frac{\rho}{R} = \left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_e \cdot \frac{E}{C_e E} \cdot \frac{C_R R}{R} = \left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_e \cdot \frac{C_R}{C_e} \tag{23}$$

Учитывая выражение (20) получим выражение для расчета электронных потерь, $эВ/см$:

$$\left(\frac{dE}{dR}\right)_e = S_e(\varepsilon) \cdot \frac{C_R}{C_e} = k_e \varepsilon^{1/2} \cdot \frac{C_R}{C_e} = k_e (C_e E)^{1/2} \cdot \frac{C_R}{C_e} = k_e E^{1/2} \cdot \frac{C_R}{C_e^{1/2}} \tag{24}$$

Следует отметить, что зависимость не является универсальной для любой пары «ион–мишень».

Распределение пробегов ионов.

Пробег иона (*R, см*) определяется с учётом известных ядерных и электронных тормозных потерь может быть рассчитан по формуле:

$$R = \frac{E}{n(S_e + S_n)} = \frac{E}{\left(\frac{dE}{dR}\right)_n + \left(\frac{dE}{dR}\right)_e} \tag{25}$$

Энергия иона определяется по формуле, $эВ$:

$$E = zU \tag{26}$$

где z – кратность заряда иона; U – ускоряющее напряжение, В.

Доза имплантации определяется по формуле:

$$D = \frac{N}{S} = \frac{J\tau t f}{q_e S} \tag{27}$$

где N – количество имплантированных ионов; J – сила тока, A; S – площадь мишени, $см^2$; τ – длительность импульса, $\tau = 2.5 \cdot 10^{-4} c$; f – частота импульса, $Гц$; q_e – заряд электрона ($q_e = 1.6 \cdot 10^{-19}\ Кл$); t – время имплантации, c.

Разброс значений пробегов ΔR определяется по формуле:

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{0.8\left(M_1 M_2\right)^{1/2}}{M_1 + M_2} \tag{28}$$

Распределение ионов по глубине проникновения описывается следующей формулой:

$$N(x) = \frac{D}{\sqrt{2\pi}\Delta R} \exp\left[-(x-R)^2 / \left(2\Delta R^2\right)\right] \tag{29}$$

где концентрация $N(x)$ рассчитывается в $см^{-3}$.

Расчеты

Вывод по лабораторной работе

Объекты исследования, применяемые исследовательские методики

Полученные результаты

Заключение