

01;05;10

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ СОСТАВА СЛОЖНЫХ И МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУР В ПРОЦЕССЕ ИОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ

© Б.Я.Бер, Е.Е.Журжин, А.В.Меркулов, Ю.В.Трушин, В.С.Харламов

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе РАН,  
194021 Санкт-Петербург, Россия  
(Поступило в Редакцию 11 января 1995 г.)

Разработана методика компьютерного моделирования баллистической стадии ионного распыления, позволяющая описывать динамическое изменение состава слоистого материала в результате пространственного наложения каскадов при больших дозах облучения. Методика модифицирована по отношению к алгоритмам существующих динамических программ. В частности, учтено влияние объемов образующихся точечных дефектов и имплантированных ионов на изменение параметров материала в процессе облучения. Проведены тестовые расчеты ионного травления мишеней гомогенного GaAs и GaAs с  $\delta$ -слоем кремния. Результаты расчетов качественно соответствуют экспериментальным данным по ВИМС профилированию образцов GaAs,  $\delta$ -легированного кремнием.

### Введение

Ионное травление в комбинации с поверхностно-чувствительными методами, такими как вторично-ионная масс-спектроскопия (ВИМС), является одним из основных методов, используемых при исследовании профилей состава многослойных гетероструктур по глубине. Поскольку ионное травление является по сути ионным облучением вещества, то в материале происходят те же физические процессы, которые сопровождают взаимодействие излучения с веществом. При облучении материала ионами в диапазоне энергий, используемом при ионном травлении ( $E \sim 1-10$  кэВ), можно выделить две группы процессов: каскадные (или баллистические) и диффузионные.

Бомбардирующий ион, попадая в мишень, теряет свою энергию в основном за счет двух процессов: упругих соударений с атомами вещества, вовлекающих в свою очередь в каскадный процесс новые атомы, и неупругих взаимодействий с электронной подсистемой мишени. Те же процессы происходят с движущимися в каскаде атомами мишени в зависимости от их энергий [1,2]. Упругие процессы приводят к изменению структуры материала в результате образования радиационных дефектов, распыления поверхности, баллистического перемешивания

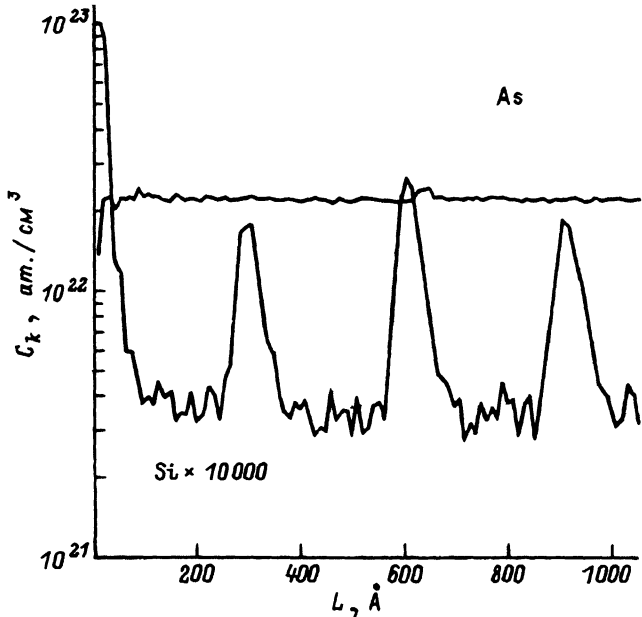


Рис. 1. Экспериментальные ВИМС профили концентраций  $C_k$ , ( $k = \text{As}, \text{Si}$ ) компонент арсенида галлия,  $\delta$ -легированного кремнием, в зависимости от глубины  $L$  при травлении ионами  $\text{O}_2^+$  (1.46 кэВ/атом).

неоднородных по составу мишеней и т. д. Каскадный процесс развивается за времена порядка  $10^{-13}$  с.

Баллистическим процессам при ионном облучении сопутствует радиационно-стимулированная диффузия. Она возникает вследствие образования в материале при облучении неоднородностей концентрации атомов и дефектов за счет баллистического перемешивания атомов вещества и связанного с этим образования областей с высокой концентрацией дефектов. Характерные времена диффузионных процессов значительно больше времен развития каскадных процессов. Кроме того, баллистические процессы могут сопровождаться радиационно-стимулированной сегрегацией и адсорбцией по Гиббсу.

Диффузионные процессы, так же как и баллистические, приводят к изменению состава мишени по глубине. Общее изменение состава определяется совокупностью этих процессов. Ионное травление связано со значительными дозами облучения, что приводит к существенному изменению состава мишени в приповерхностной области. Поскольку состав материала в процессе травления мишени меняется, то в экспериментах по определению глубинных концентрационных профилей компонент гетероструктуры с помощью ионного травления получают информацию не об исходных профилях, а о профилях, модифицированных радиационными процессами. Такие данные позволяют лишь приблизительно судить о первоначальной структуре материала. Результаты одного из экспериментов по определению профилей компонент, в котором использовался метод ВИМС профилирования [3], представлены на рис. 1. Исследованный в этом эксперименте материал представлял собой специально приготовленный автоэпитаксиальный слой GaAs с ориентацией поверхности (001), выращенный методом

молекулярно-пучковой эпитаксии, содержащий периодические слои, планарно легированные атомами Si с концентрацией в слое порядка  $10^{12}$  ат/см<sup>2</sup>. Слои атомов кремния залегали через каждые 300 Å от поверхности структуры. Рост производился при достаточно низкой температуре подложки (порядка 400 °C) с целью подавления сегрегационных эффектов и самодиффузии атомов Si. ВИМС профилированные распределения концентрации атомов Si по глубине проводилось на ВИМС микроскопе САМЕСА IMS4f. Пучок первичных ионов O<sub>2</sub><sup>+</sup> с энергией 1.46 кэВ/атом падал на образец под углом 55° к нормали. Регистрировались вторичные ионы <sup>28</sup>Si<sup>+</sup> в режиме высокого массового разрешения ( $\Delta M/M \leq 1/2300$ ). Концентрация атомов кремния определялась с использованием внешнего эталона — образца GaAs (001), имплантированного кремнием. Из полученного экспериментального профиля кремния можно сделать вывод о наличии в исходном материале тонких легированных кремнием слоев, но нельзя непосредственно определить их параметры. Для того чтобы выяснить, как меняется состав гетероструктуры по глубине при ее ионном травлении и иметь возможность восстанавливать по экспериментальным данным первоначальное распределение состава гетероструктуры, необходимо дополнительно провести компьютерное моделирование процесса ионного травления.

В основе моделирования ионного травления лежит моделирование одиночного каскадного процесса. В настоящее время математическое моделирование каскадных процессов, происходящих при ионном облучении твердотельной мишени, осуществляется на основе трех различных методов: метода молекулярной динамики, метода Монте-Карло (при разыгрывании парных столкновений атомов или ионов), а также методом, основанном на кинетической теории переноса. Все они требуют для своей реализации применения компьютеров с высоким быстродействием.

Метод Монте-Карло широко используется для моделирования развития каскада столкновений при ионной бомбардировке в рамках модели парных столкновений (BCA-модели в английской аббревиатуре) как для неупорядоченных (аморфных) веществ, так и для монокристаллов. Среди компьютерных программ, работающих для материалов первого типа, наиболее известна программа TRIM [4-7], для второго — MARLOWE [8,9]. Данные алгоритмы послужили прообразом для целого ряда других подобных программ, направленных на изучение самых разнообразных физических явлений, связанных с проникновением быстрых ионов в твердое тело. Так, недавно для моделирования каскадов в аморфных веществах была создана программа TRIRS [10]. Данная программа базируется на тех же физических принципах, что и TRIM, однако при этом в алгоритм внесены некоторые усовершенствования и уточнения, которые позволяют улучшить согласие результатов моделирования с экспериментом в широком диапазоне энергий атомов (от нескольких эВ до нескольких МэВ на атом).

1) В частности, при рассмотрении рассеяния атомов принимается во внимание "интеграл времени", рассчитываемый исходя из выбранного вида потенциала рассеяния, а не в приближении твердых сфер, как это делалось ранее [4-6]. Фактически это максимально приближает рассматриваемые траектории движения частицы в каскаде к асимптотам их реальных траекторий движения.

2) Угол рассеяния атомов в системе центра масс рассчитывается исходя из вычисления классического интеграла рассеяния с помощью специальных квадратур, обеспечивающих достаточно высокую скорость вычислений. При этом достигается более высокая точность, чем при использовании “магической формулы” [4,6]. В программе также реализована возможность проводить расчеты угла рассеяния и с использованием “магической формулы”.

3) Электронное торможение учитывается в рамках модели непрерывного замедления, что вполне корректно в рассматриваемом диапазоне энергий; при этом в отличие от программы TRIM достигается лучшее согласие с экспериментом (в том числе и по распылению) без введения дополнительных подгоночных параметров, связанных с рассмотрением механизма локальных неупругих потерь энергии.

4) При низких энергиях движущихся атомов в каскаде, когда в характерную область взаимодействия попадает более одного атома, в программе осуществляется приближенный учет многочастичных взаимодействий.

5) В программе также заложена возможность широко варьировать структуру многослойной мишени: она может иметь до 8 различных слоев по глубине и ее состав может содержать до 10 сортов атомов в каждом слое. При этом энергетические параметры, характеризующие мишень (энергии смещения  $E_a^{kl}$  и связи  $E_b^{kl}$ , а также поверхностный барьер  $E_s^k$ ) задаются индивидуально как для каждого сорта атома  $k$ , так и для каждого слоя мишени  $l$ , что позволяет проводить моделирование, принимая во внимание возможную зависимость указанных энергетических параметров от глубины залегания атома в мишени.

Кроме того, в программе TRIRS заложена возможность варьирования потенциалов упругого рассеяния и моделей электронного торможения. Как показало тестирование, наилучшее согласие с экспериментом достигается при использовании “универсального потенциала” и ZVI-модели электронного торможения [6].

Большинство расчетов, выполненных с помощью подобных программ, относится к задачам, связанным с низкодозной имплантацией, когда не происходит существенного изменения состава мишени в процессе облучения. При высокодозной имплантации такое изменение становится существенным в процессе облучения и пренебрегать этим эффектом уже нельзя. Для моделирования высокодозного облучения, к которому, в частности, относится ионное травление, разработаны динамические версии рассмотренных выше каскадных программ, которые позволяют рассчитать динамическое изменение состава мишени при пространственном наложении каскадов. Эти программы базируются на итерационной процедуре, суть которой отражена на блок-схеме. При этом весь процесс облучения с полной дозой  $\Phi$  условно разбивается на  $N$  последовательных итераций, причем каждая из них условно идентифицируется с неким “псевдоснарядом”, который физически соответствует набору дозы  $\Delta\Phi$ . Число таких интерпретаций  $N$  (“псевдоснарядов”) выбирается таким, что в пределах дозы  $\Delta\Phi$  изменения состава материала были бы незначительными. При этом на каждом шаге итераций вначале с помощью алгоритма, базирующегося на ВСА-модели (например, программы TRIM), рассчитываются средние параметры единичного каскада (распределения внедренной при облучении примеси, радиационных дефектов, атомов отдачи, пар-



циальные выходы распыления и т. д.), которые затем линейно нормируются на дозу  $\Delta\Phi$ . Затем разыгрывается следующий "псевдоснаряд", который попадает уже в модифицированную предыдущим "псевдоснарядом" мишень. Такая процедура повторяется до тех пор, пока не будет набрана требуемая доза  $\Phi$ .

Приведенный общий алгоритм моделирования применялся в ряде работ [11–20] по моделированию динамического изменения состава материала в процессе высокодозного облучения. Доза  $\Delta\Phi$  в этих работах выбиралась достаточно малой ( $\sim 10^{11} - 10^{13} \text{ см}^{-2}$ ). Это делалось либо эмпирически, либо исходя из тех соображений, что должна быть мала концентрация дефектов, образованных при облучении этой дозой, относительно концентрации атомов в мишени. Такой выбор дозы  $\Delta\Phi$  вполне позволяет получать статистически значимые результаты за приемлемое машинное время в задачах по высокодозной ионной имплантации, к которым чаще всего и применяли динамические компьютерные программы. Наиболее известная среди этих программ — TRIDYN [11–13]. В ней для расчета среднего единичного каскада использовалась программа TRIM. А в работе [11] впервые была описана процедура пересчета параметров мишени, принятая впоследствии целиком или с небольшими изменениями во многих других работах. Она основана на предположениях, что все атомы каждого сорта занимают фиксированный объем независимо от того, в каком положении (межузельном или решеточном) они находятся и что происходит релаксация материала, приводящая к полному исчезновению вакансий. По-

сле баллистического розыгрыша очередного "псевдоснаряда" в этой процедуре определяется число атомов каждого сорта, оказавшихся в каждом слое. Исходя из размеров атомов и их количеств в каждом слое однозначно определяются параметры этих слоев, т. е. параметры материала. Используемые в этой процедуре предположения позволяют избежать нефизичного сильного изменения плотности материала мишени, но при этом пренебрегается некоторыми важными факторами, вследствие чего несколько упрощенно описывается динамика изменения состава. Так, в частности, в такой процедуре не учитывается влияние остающихся в мишени вакансий и имплантированных ионов на изменение параметров материала, а также различное влияние атомов решетки и атомов в межузельных положениях. Фактически, такая ситуация соответствует предельному случаю полной релаксации материала, когда вакансии в нем исчезают, а межузельные атомы занимают узлы кристаллической решетки.

Таким образом, имеющиеся к настоящему времени компьютерные разработки не позволяют учесть все реальные радиационные изменения при исследовании структуры материалов методом ионного травления. В частности, не учитывается зависимость значений параметров дефектообразования как от сорта атомов, составляющих мишень, так и от глубины залегания атомов от поверхности. Исходя из этого в настоящей работе предлагается динамическая методика компьютерного моделирования высокодозного ионного облучения многокомпонентной мишени, базирующаяся на программе TRIRS и учитывающая влияние объемов радиационных точечных дефектов на макроскопические изменения в мишени.

### Методика компьютерного моделирования

Ионное травление — существенно высокодозный процесс, в результате которого происходит пространственное наложение каскадов, приводящее к значительным изменениям структуры облученной мишени. Полные дозы облучения при ионном травлении обычно превышают полные дозы при ионной имплантации. Отсюда вытекает, что желательно выбрать дозу  $\Delta\Phi$  большой, с тем чтобы уменьшить число итераций и соответственно сократить время расчета. В то же время слишком большой  $\Delta\Phi$  быть не может вследствие требования линейности изменения состава мишени в пределах самой этой дозы. Поэтому выбор дозы  $\Delta\Phi$  при моделировании ионного травления представляет собой непростую задачу.

В работе предполагается, что пучок ионов равномерно распределяется по поверхности мишени и, таким образом, проекции сечений каскадов, образованных отдельными ионами, в среднем равномерно заполняют поверхность. Такой процесс заполнения поверхности продолжается до тех пор, пока в среднем вся поверхность не окажется "заполненной" проекциями поперечных сечений каскадов. После этого при увеличении дозы полагаем, что ионы попадают в мишень, модифицированную предыдущими каскадами, и происходит наложение каскадов второго и первого "заполнений" поверхности. Такое последовательное наложение каскадов продолжается до момента накопления полной дозы облучения материала. Исходя из описанной процедуры изменение состава мишени будет линейным при дозе  $\Phi_0$ , эквивалентной одному заполнению поверхности мишени. При этом еще не происходит пространственного наложения каскадов и  $\Phi_0 = 1/\sigma$ , где  $\sigma$  —

реднее поперечное сечение (площадь проекции) каскада одного иона. Однако изменение состава мишени может быть практически линейным и при дозах, бóльших, чем  $\Phi_0$ , поскольку средняя плотность радиационных повреждений, вносимых одиночным каскадом, незначительна и требуется накопить определенное число каскадов, чтобы изменение состава стало заметным. Поэтому для дозы, соответствующей одному "псевдоснаряду", можно записать  $\Delta\Phi = \Phi_0 \cdot n_c$ . Для GaAs при конкретных параметрах облучения, использованных в эксперименте [3] (рис. 1), тестовым расчетом было показано, что при  $n_c \leq 20$  состав материала с ростом дозы изменяется практически линейно. В результате доза, приходящаяся на один "псевдоснаряд", была выбрана как  $\Delta\Phi = n_c/\sigma = 4 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ . Поэтому в дальнейшем при описании процедуры пересчета параметров мишени при пространственном наложении каскадов один шаг итерации  $j$  соответствует облучению мишени дозой  $\Delta\Phi$ , причем  $j = 1, \dots, \Phi/\Delta\Phi$ , где  $\Phi$  — полная доза облучения.

Предлагаемая в настоящей работе методика моделирования основана на общем алгоритме (блок-схема), но вместе с тем модифицирована по отношению к методике работы [11] как на этапе расчета среднего единичного каскада в мишени, так и на этапе пересчета параметров материала. При этом, так же как и в большинстве подобных работ [5,7,9], объемная энергия связи атомов считалась достаточно малой и полагалась  $E_b^{kl} \simeq 0-1$  эВ, а величина поверхностного барьера  $E_s^k$  считалась равной энергии сублимации соответствующего типа атома  $k$  ( $E_s^{\text{Ga}} = 2.82$  эВ,  $E_s^{\text{As}} = 1.26$  эВ [6]). Как показано в [5], такой выбор  $E_b^{kl}$  и  $E_s^k$  позволяет корректно описывать процесс распыления. Для описания дефектообразования в качестве  $E_d^{kl}$  брались стандартные значения пороговой энергии смещения атомов соответствующих сортов (для Ga  $E_d^{kl} = 9.0$  эВ, для As  $E_d^{kl} = 9.4$  эВ [21]).

В случае мишени однородного состава производится ее разбиение на 5 слоев по глубине. Каждый из двух первых слоев имеет толщину  $h$ , примерно равную характерной глубине выхода распыленных атомов  $\Delta x$  (для GaAs величина  $\Delta x$  составляет около 8 Å). При проведении расчета величины пороговых энергий смещения атомов  $E_d^{kl}$  в этих слоях задавались меньше, чем  $E_d^{kl}$  в объеме материала, и полагались равными энергиям поверхностного барьера  $E_s^k$ . Выделение таких слоев необходимо для корректного описания распыления поверхности мишени, поскольку атомы отдачи, получившие энергию, меньшую, чем  $E_d^{kl}$ , могут быть распылены в процессе развития каскада. При этом, однако, завышается дефектообразование в этих слоях, которое должно определяться стандартным значением энергии смещения. Поэтому для получения реального количества дефектов в этих слоях использовалась перенормировка с учетом, например, формулы Кинчина–Пиза [22]. Остальная часть мишени разбивалась на три слоя. В них задавалось стандартное значение энергии смещения атомов  $E_d^{kl}$ . Таким образом, в рассмотренной процедуре одновременно описывались как распыление, так и дефектообразование. При этом считалось, что происходит полная послойная рекомбинация пар вакансия–межузельный атом. Поэтому выделение этих слоев производилось в соответствии со знаком распределения по глубине точечных дефектов, являющегося раз-

ностью между распределениями межузельных атомов и вакансий. В третьем от поверхности слое количество вакансий превышало количество межузельных атомов, в следующем (четвертом) тех и других было примерно поровну, а в последнем (пятом) был избыток межузельных атомов. Переразбивка мишени на новые слои делалась тогда, когда первый слой оказывался распыленным. Слой считается распыленным, когда его толщина становилась меньше половины толщины монослоя материала, т. е. меньше  $1.41 \text{ \AA}$  для мишени GaAs. В этом случае остаток приповерхностного слоя объединяется со вторым, а из ближайшего слоя, толщина которого значительно больше глубины выхода распыленных атомов  $\Delta x$ , выделяется новый слой ближе к поверхности с толщиной, равной  $h$ . При такой процедуре переразбивки мишень всегда оказывается разбита на 5 слоев, из которых два первых имеют суммарную толщину больше  $\Delta x$ , что позволяет корректно учитывать распыление.

Пересчет параметров мишени после розыгрыша каскада, соответствующего одному "псевдоснаряду", производится с учетом влияния объемов, занимаемых избыточными точечными дефектами, на параметры материала. Из расчетов распределений дефектов в каскадной области получаются величины абсолютных концентраций  $C_{qk}^j(x)$  дефектов  $q$  ( $q = V$  — вакансии,  $q = I$  — межузельные атомы), нормированных на дозу  $\Delta\Phi$ , в подсистеме компонента мишени  $k$  на глубине  $x$ , генерированных на  $j$ -м шаге итераций. Исходными данными для процедуры пересчета являются 1) разности  $C_k^j(x) = C_{Ik}^j(x) - C_{Vk}^j(x)$  концентрации дефектов в  $k$ -й подсистеме; 2) концентрации имплантированных ионов  $C_i^j(x)$ ; 3) парциальные коэффициенты распыления  $Y_k^j$  из каждого слоя  $l = 1, 2, \dots, 5$ .

Полное число избыточных дефектов в  $k$ -й подсистеме, внесенных в слой  $l$  при моделировании на  $(j + 1)$ -м шаге итераций, можно оценить

$$\delta N_k^{j+1,l} = S \int_{(l)} \left[ C_k^{j+1}(x) + \delta_{ki} \cdot C_i^{j+1}(x) \right] dx, \quad (1)$$

где  $S$  — площадь поверхности мишени,  $\delta_{ki}$  — символ Кронекера, интегрирование ведется по всей толщине  $d^{j,l}$  слоя с номером  $l$ .

При этом стехиометрический состав  $\xi_k^{j+1,l}$ , длина  $d^{j+1,l}$  и плотность слоя  $\rho^{j+1,l}$  после  $(j + 1)$ -й итерации вычисляется следующим образом:

$$\xi_k^{j+1,l} = \frac{N_k^{j+1,l} \cdot 100\%}{\sum_k N_k^{j+1,l}}, \quad (2)$$

$$d^{j+1,l} = d^{j,l} - \frac{1}{S} \cdot \sum_k \delta N_k^{j+1} \cdot \Omega_{qk} - \frac{1}{S} \cdot Y^{j+1,l} \cdot \Omega, \quad (3)$$

$$\rho^{j+1,l} = \frac{\sum_k N_k^{j+1,l} \cdot M_k}{S \cdot d^{j+1,l}}. \quad (4)$$



Здесь  $M_k$  — масса атома сорта  $k$ ;  $\Omega = \Omega_0/N_0$ , где  $N_0$  — число атомов в элементарной ячейке,  $\Omega_0$  — ее объем,  $\Omega_{qk}$  — объем дефекта типа  $q$  в  $k$ -й подсистеме, причем

$$\Omega = \begin{cases} \Omega_{Ik} & \text{при } \delta N_k^{j+1,l} > 0, \\ \Omega_{V_k} & \text{при } \delta N_k^{j+1,l} < 0. \end{cases} \quad (5)$$

Изложенная методика моделирования ионного травления относится к гомогенным полиатомным мишеням. В случае гетероструктур необходимо несколько модифицировать разбиение мишени на слои, чтобы корректно учесть баллистическое перемешивание на границах слоев различного состава. Поэтому при моделировании травления структуры GaAs  $\delta$ -легированного кремнием, которое было проведено в качестве тестового расчета, мишень разбивалась на 7 слоев по глубине. Первые от поверхности слои, как и ранее, выделялись для учета распыления. Три слоя (сам  $\delta$ -слой толщиной 3 Å и по одному слою каждой стороны  $\delta$ -слоя толщиной  $h = 8$  Å) отводились для возможности моделирования размытия  $\delta$ -слоя. Еще два слоя — для оставшейся части мишени.

Поскольку в расчетах исходная глубина залегания одиночного  $\delta$ -слоя была взята, как и в эксперименте, равной 300 Å, а глубина распространения каскада не превышает 100 Å (причем подавляющая часть каскада лежит в пределах 70 Å), то на начальной стадии травления мишень фактически представляет собой гомогенный GaAs. Поэтому можно воспользоваться результатами моделирования травления гомогенного GaAs, проведенного ранее. Как известно [23], травление гомогенных мишеней через некоторое время выходит на стационарный режим, когда состав мишени по глубине и коэффициенты распыления перестают изменяться. Исходя из этого моделирование травления мишени с  $\delta$ -слоем было “начато” с момента, когда каскадная область начинает достигать  $\delta$ -слоя, а именно с 230 Å. При этом параметры первых четырех слоев мишени, расположенных перед  $\delta$ -слоем, задавались такими, какими они получились для гомогенной мишени при выходе на стационарный режим травления. В расчетах состав  $\delta$ -слоя был задан как Ga<sub>0.45</sub>As<sub>0.45</sub>Si<sub>0.10</sub>. При этом относительная концентрация кремния составляла 10%, что примерно в 100 раз больше, чем в эксперименте. Такое задание концентрации кремния в расчетах было связано с необходимостью получить статистически значимые результаты за приемлемое машинное время. Расчет с таким значением концентрации кремния, достаточно хорошо заменяет расчет с концентрацией кремния, равной экспериментальной. Действительно, отличие профилей концентрации Si для этих двух случаев может быть связано только с изменением баллистического движения атомов из-за различной концентрации кремния в планарно-легированном слое матрицы. При реальных малых концентрациях кремния баллистика практически полностью определяется столкновениями с атомами матрицы. Если же концентрация кремния значительно больше, то кремний уже может в некоторой степени влиять на баллистическое движение атомов. В частности, атом кремния, движущийся в каскаде, может в этом случае столкнуться не только с атомами матрицы, но и с другим атомом кремния. Именно столкновения Si-Si определяют искажения формы

профилю в отношении к профилю для случая малых концентраций, когда таких столкновений не происходит. Приближенная оценка вероятности столкновения Si-Si для исходной концентрации кремния в  $\delta$ -слое, равной 10%, показала, что эта вероятность не превышает 5%. Это означает, что искажения не велики и можно выполнять расчет для 10%-го Si в  $\delta$ -слое. Состав последних двух слоев задавался как исходный  $Ga_{0.5}As_{0.5}$ .

Таким образом, в настоящей работе разработана динамическая версия DYTRIRS программы TRIRS, где расчеты единичного каскада для каждого "псевдоснаряда" происходят по линейной методике [10], а динамическая процедура осуществляется в соответствии с изложенным выше алгоритмом.

## Результаты и обсуждение

На основе разработанной компьютерной методики моделирования были проведены тестовые расчеты травления как гомогенной мишени арсенида галлия, так и мишени GaAs с  $\delta$ -слоем кремния.

Результаты моделирования гомогенного GaAs представлены на начальных участках рис. 2 и 3. Из рис. 2 видно, что при травлении гомогенного образца GaAs парциальные коэффициенты распыления выходят на стационарные значения. Рис. 3 демонстрирует обеднение приповерхностного слоя атомами мышьяка, что соответствует экспериментальным данным [23]. Из сравнения результатов расчета (рис. 2) с экспериментальными данными (рис. 1) видно, что глубина, на которой устанавливаются стационарные значения коэффициентов распыления, в эксперименте несколько больше, чем в расчете. Однако нельзя в этой части корректно сопоставить экспериментальный и расчетный результаты, поскольку в эксперименте не установление стационарного

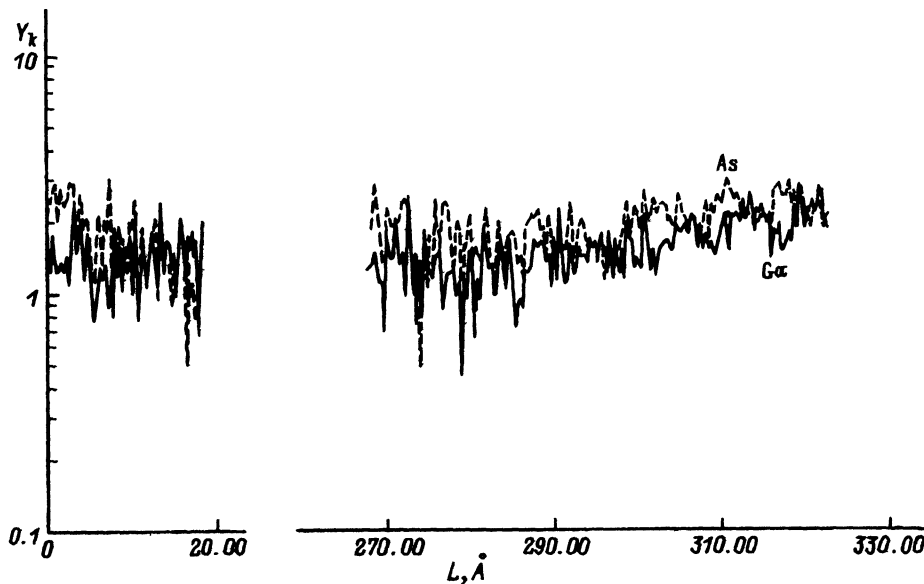


Рис. 2. Парциальные коэффициенты распыления  $Y_k$  элементов  $k = As, Ga$  в зависимости от толщины  $L$  распыленного слоя GaAs.

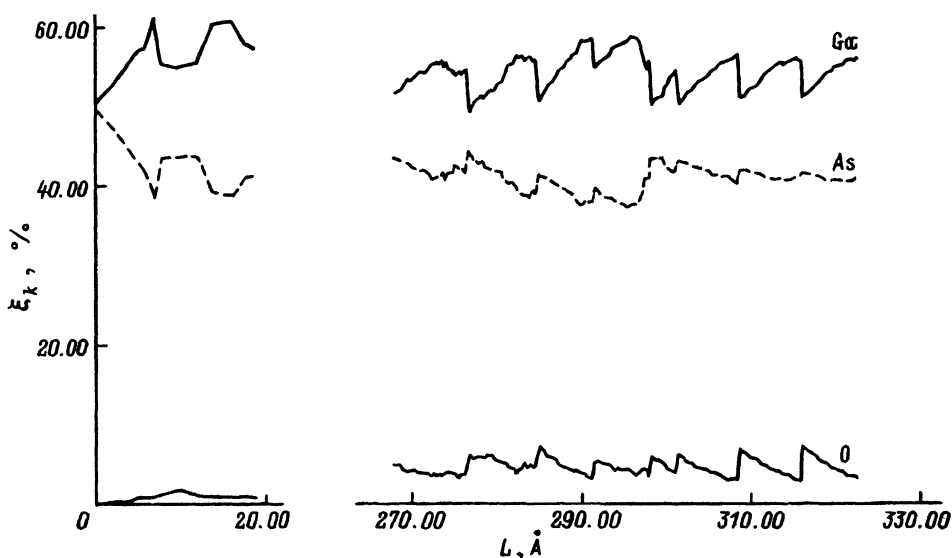


Рис. 3. Относительное содержание  $\xi_k$  элементов  $k = \text{As}, \text{Ga}$  в зависимости от толщины  $L$  распыленного слоя GaAs.

режима влияет не только селективность распыления, но также наличие слоя естественного окисла на поверхности образца и связанное с этим изменение вероятности выхода ионов, что не может быть пока смоделировано.

Результаты расчетов травления мишени с  $\delta$ -слоем кремния представлены в правых частях рис. 2,3 и на рис. 4,5. Из рис. 2,3 видно, что после выхода на стационарный режим парциальные коэффициенты распыления и состав основных атомных компонент мишени и имплантированного кислорода остаются постоянными. Рис. 4,5 демонстрируют размытие исходного  $\delta$ -пика кремния. Величина этого размытия, полученная в расчете, составляет 50–60 Å. Расчетный профиль кремния имеет характерную асимметрию формы: в частности, передний фронт расчетного пика кремния круче, чем задний фронт, что согласуется с экспериментальным профилем (рис. 1).

Таким образом, получено размытие  $\delta$ -пика кремния, качественно совпадающее с экспериментом. Однако абсолютная величина ширины размытия  $\delta$ -пика в расчете оказывается меньше, чем в эксперименте, что может быть связано с тем, что в нашей модели пока не учитываются процессы радиационно-стимулированной диффузии, которые могут приводить к дополнительному уширению профиля кремния, и развитие морфологии поверхности мишени в процессе ее ионного травления.

### Выводы

В работе изложена методика компьютерного моделирования баллистической стадии ионного травления, позволяющая описывать динамическое изменение состава многослойной гетероструктуры в результате пространственного наложения каскадов при больших дозах облучения.

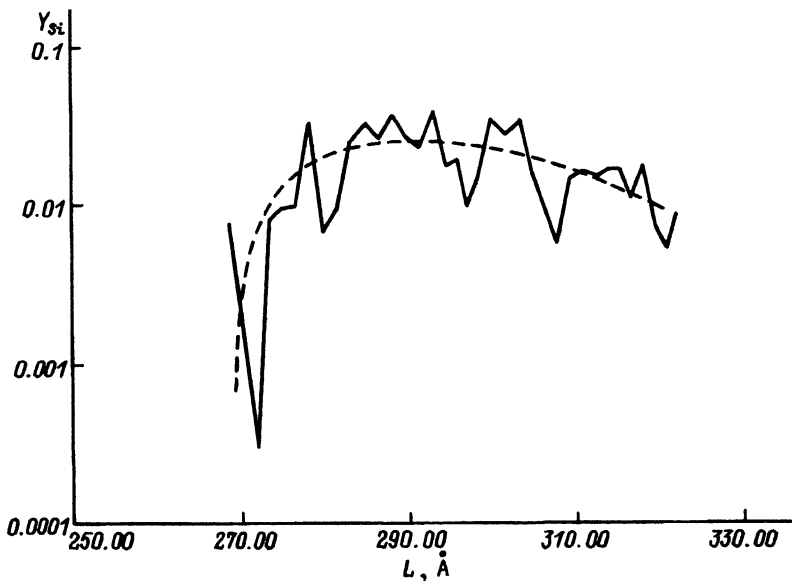


Рис. 4. Зависимость коэффициента распыления  $Y_{Si}$  кремния от толщины  $L$  распыленного слоя GaAs,  $\delta$ -легированного кремнием (сплошная кривая) и ее полиномиальная интерполяция (штриховая).

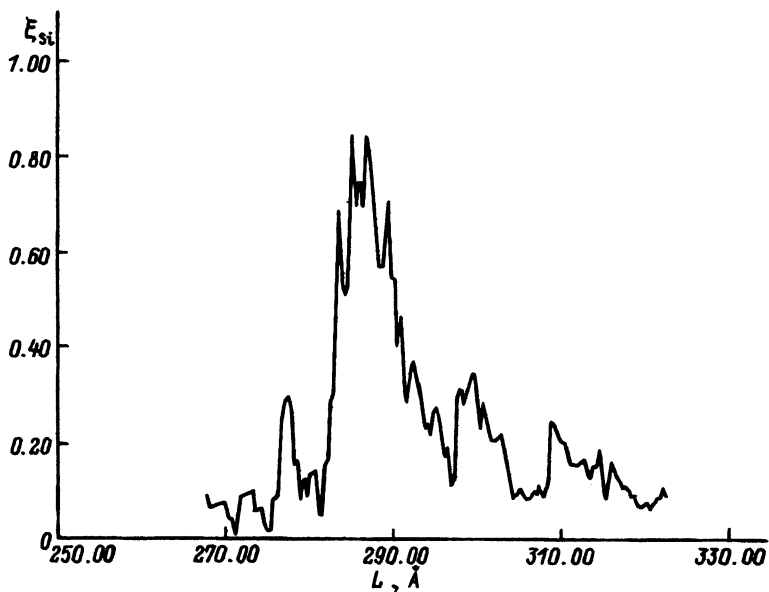


Рис. 5. Зависимости относительного содержания  $\xi_k$  кремния от толщины  $L$  распыленного слоя GaAs,  $\delta$ -легированного кремнием.

На основе разработанной методики проведения тестовые компьютерные расчеты баллистической стадии ионного травления гомогенной мишени арсенида галлия. Рассчитанные зависимости парциальных коэффициентов распыления и относительного содержания компонент в приповерхностной области от стравленной толщины мишени демонстрируют выход процесса травления на стационарный режим. Получен состав поверхностного слоя, количественно совпадающий с экспериментальными данными по селективности распыления.

Также выполнены тестовые компьютерные расчеты баллистической стадии ионного травления мишени арсенида галлия с  $\delta$ -слоем кремния. Полученные в расчете зависимости парциальных коэффициентов распыления и относительного содержания компонент в приповерхностном слое от распыленной толщины мишени демонстрируют размытие  $\delta$ -слоя кремния в процессе ионного травления. При этом форма профиля  $\delta$ -слоя качественно совпадает с результатами проведенных экспериментов. Высказано предположение о причинах различия абсолютных величин ширины размытия  $\delta$ -слоя в расчете и эксперименте.

### Список литературы

- [1] *Thompson M.W.* Defects and Radiation Damage in Metals. Cambridge: University Press, 1969. 367 p.
- [2] *Lehmann Chr.* Interaction of Radiation with Solids and Elementary Defects Production. Amsterdam: North-Holland, 1977. 341 p.
- [3] *Бер В.Я., Меркулов А.В.* // Научное приборостроение. 1992. Т. 2. С. 31.
- [4] *Biersack J.P., Haggmark L.G.* // Nucl. Instr. and Meth. 1980. Vol. 174. P. 257.
- [5] *Biersack J.P., Eckstein W.* // Appl. Phys. 1984. Vol. A34. P. 73.
- [6] *Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U.* The Stopping and Range of Ions in Solid. New York: Pergamon Press, 1985.
- [7] *Biersack J.P.* // Nucl. Instr. and Meth. 1987. Vol. B27. P. 21.
- [8] *Robinson M.T., Torrens J.M.* // Phys. Rev. 1974. Vol. B9. P. 5008.
- [9] *Robinson M.T.* // Sputtering by Particle Bombardment I / ed. R. Behrish. Berlin; Heidelberg; New York: Springer-Verlag, 1981. P. 99.
- [10] *Журкин Е.Е.* // Материалы XI конф. "Взаимодействие ионов с поверхностью 1993". Москва, 1993. Т. 3. С. 105.
- [11] *Möller W., Eckstein W.* // Nucl. Instr. and Meth. 1984. Vol. B2. P. 814.
- [12] *Möller W., Eckstein W.* // Nucl. Instr. and Meth. 1985. Vol. B7/8. P. 727.
- [13] *Möller W., Eckstein W., Biersack J.P.* // Comput. Phys. Commun. 1988. Vol. 51. P. 355.
- [14] *Budinov H.I., Karpuzov D.S.* // Nucl. Instr. and Meth. 1990. Vol. B47. P. 33.
- [15] *Todorov S.S., Chakarov I.R., Karpuzov D.S.* // Nucl. Instr. and Meth. 1992. Vol. B65. P. 79.
- [16] *Chakarov I.R., Karpuzov D.S., Todorov S.S.* // Nucl. Instr. and Meth. 1992. Vol. B69. P. 193.
- [17] *Todorov S.S. et al.* // Surf. Sci. 1992. Vol. 271. P. 641.
- [18] *Shonborn A., Heching N., Te Kaat E.H.* // Nucl. Instr. and Meth. 1989. Vol. B43. P. 170.
- [19] *Bussman U., Hemment P.L.F.* // Nucl. Instr. and Meth. 1990. Vol. B47. P. 22.
- [20] *Kim J.H. et al.* // Nucl. Instr. and Meth. 1992. Vol. B71. P. 271.
- [21] *Василов В.С., Кие А.Е., Ниязова О.П.* Механизмы образования и миграции дефектов в полупроводниках. М.: Наука, 1981. 368 с.
- [22] *Kinchin G.H., Pease R.S.* // Rep. Progr. Phys. 1955. Vol. 18. P. 1.
- [23] *Betz G., Wehner G.K.* // Sputtering by Particle Bombardment II / ed. R. Behrish. Berlin; Heidelberg; New York; Tokyo: Springer-Verlag, 1983. P. 24.