

# Анализ параметров индивидуальных каскадов столкновений при облучении $\text{Ga}_2\text{O}_3$ атомарными и молекулярными ионами

© А.И. Стручков, К.В. Карабешкин, П.А. Карасев, А.И. Титов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
195251 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: andrei.struchckov@yandex.ru

Поступила в Редакцию 20 сентября 2023 г.

В окончательной редакции 29 ноября 2023 г.

Принята к публикации 29 ноября 2023 г.

Плотность каскадов столкновений является одним из основных параметров, определяющих эффективность накопления повреждений в полупроводниках при бомбардировке ионами. Нами был проведен расчет параметров каскадов столкновений в  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  для случаев облучения атомарными ионами F, P и молекулярными  $\text{PF}_4$  ионами с энергиями 1.3 кэВ/а.е.м. по двум различным методам, базирующимся на моделировании каскадов столкновений. Результаты расчетов были сопоставлены с экспериментальными результатами по накоплению разупорядочения в  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  при облучении указанными ионами. Показано, что оба метода позволяют качественно предсказывать влияние плотности каскадов на накопление устойчивых радиационных повреждений в оксиде галлия. Показано, что каскады в случае имплантации ионов в  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  могут рассматриваться как фракталы. Произведен расчет фрактальной размерности каскадов столкновений в рассмотренных случаях.

**Ключевые слова:** Оксид галлия,  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ , ионное облучение, инженерия дефектов, плотность каскадов столкновений.

DOI: 10.61011/FTP.2023.09.56988.5560

## 1. Введение

Ионная имплантация является одним из основных методов, используемых при создании полупроводниковых приборов для введения легирующей примеси, создания электрически изолирующих областей и т.д. Хорошо известно, что любая бомбардировка полупроводников ионами всегда сопровождается накоплением радиационных повреждений [1]. Характер и скорость накопления таких повреждений зависят от множества параметров, таких как энергия, плотность потока и масса ионов, а также температура подложки [1,2]. Для большинства используемых традиционных полупроводников эти зависимости в определенной степени хорошо известны.

Однако есть еще один параметр, который тоже может драматически влиять на эффективность радиационного повреждения, увеличивая концентрацию структурных повреждений при его возрастании. Таковым параметром является усредненная плотность индивидуальных каскадов смещений  $f_c$ , т.е. плотность смещенных атомов, усредненная по всем каскадам на данной глубине. Уже в ранних работах было экспериментально показано (см., например, в [3–5]), что при прочих равных условиях увеличение  $f_c$  приводит к росту уровня повреждения. При этом для случая бомбардировки атомными ионами уже давно было подсчитано, что тяжелые ионы (большие  $Z$ ) создают более плотные каскады, чем легкие.

Задача усложняется, если облучение производится молекулярными ионами, когда атомные компоненты молекул создают свои каскады, которые в свою очередь формируют итоговый суммарный каскад смещений. Та-

ким образом, предсказание влияния плотности каскадов для каждого подобного конкретного случая становится существенно сложнее. В общем случае, чтобы решать подобные задачи, необходимо иметь методику расчета, которая позволяла бы, хотя бы и в произвольных единицах, сравнивать эту плотность для разных конкретных случаев. Это позволит предсказывать, насколько более эффективным будет происходить введение структурных нарушений при имплантации двух типов ионов при одинаковых остальных условиях бомбардировки.

Таким образом, одной из основных задач настоящей публикации является сопоставление разных методов оценки значений плотности каскадов соударений. В силу существенной сложности их геометрии данные оценки являются весьма упрощенными. В то же время с точки зрения предсказания влияния этой плотности на радиационное повреждение важно не столько определение абсолютных величин, что недостаточно отработано, сколько относительные значения получаемых величин. О потенциальных возможностях и важности подобной оценки можно судить, например, по результатам, описанным в публикации [6]. В ней было показано, что при ионном облучении роль плотности каскадов в разупорядочении структуры имеет пороговый характер: увеличение плотности выше определенного критического значения приводит к быстрому росту скорости планарной аморфизации и повышенной эффективности накопления повреждений в объеме кристалла.

Ранее было также экспериментально показано, что плотность каскадов столкновений драматическим образом влияет на результирующее радиационное повре-

ждение многих полупроводников, в том числе, например, Si [7–9], SiC [10–12], ZnO [13,14], GaN [6,15,16],  $\alpha$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [17] и  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [18]. Таким образом, определение параметров каскадов для конкретного облучения является важной задачей, решение которой может позволить осуществить предсказание скорости накопления и конечного уровня радиационных повреждений.

В последнее время высок интерес к материалам, пригодным для создания электронных приборов высокой мощности и оптоэлектрических приборов нового поколения. Такие широкозонные полупроводники, как GaN, InGaN, SiC, уже успешно применяются в производстве для этих целей. Тем не менее существует потребность в материалах, обладающих еще большей запрещенной зоной ( $\geq 4$  эВ). Многообещающим полупроводником в этом отношении является бета-оксид галлия ( $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), обладающий такими характеристиками, как широкая запрещенная зона (4,85 эВ), высокие напряжение пробоя ( $\sim 8$  МВ/см), теплопроводность и подвижность электронов [19–21]. Исходя из этого все расчеты и эксперименты проводились именно для этого полупроводника.

## 2. Методы расчета плотности каскадов

Трехмерные исходные распределения первичных атомных смещений (точнее — вакансий) рассчитывались для изучаемой мишени и для облучающих ионов методом Монте-Карло с помощью кода TRIM [22]. Как известно, расчет в данной программе проводится в рамках представлений о бинарности столкновений, т.е. без учета нелинейных эффектов, которые имеют место внутри плотных каскадов и которые приводят к усилению образования дефектов (предмет данной статьи). При облучении молекулярными ионами каскады были сформированы как сумма случайно выбранных каскадов для каждого атомного компонента, входящего в состав молекулы. Итоговые распределения смещений в среднем каскаде столкновений получались в результате усреднения (более детально см. в [6]).

Полученные рассмотренным выше образом 3D распределения координат всех смещений (вакансий) использовались в дальнейшем для оценки плотности каскадов смещений. Нам известно два таких алгоритма расчета этой плотности, исключая MD-симуляцию и ранние методы оценки (см. в обзорах [5,6]). Рассмотрим их последовательно.

В первом (подробно описанном в [6]) весь полный каскад разделяется на последовательные слои, достаточно малой толщины  $\Delta X$  и параллельные поверхности мишени.

Предполагается формирование субкаскадов, состоящих из достаточно большого числа близко расположенных вакансий [6,9]. Точка влета иона в мишень принималась за начало отсчета, ось  $X$  была направлена перпендикулярно к поверхности, а оси  $Y$  и  $Z$  — параллельно. Субкаскады определялись исходя из латерально-

го распределения вакансий в каждом слое по следующему критерию: вакансии, расположенные друг от друга на расстоянии ближе 2 нм, считались принадлежащими к одному субкаскаду. Субкаскады с числом вакансий, меньшим 4, исключались из рассмотрения. В рамках одного субкаскада вычислялось среднеквадратичное отклонение вакансий от центра их распределения:

$$R_{i,j} = \frac{1}{N_{i,j}^{\text{vacancy}}} \sum_{k=1}^{N_{i,j}^{\text{vacancy}}} \left\{ \left( Y_{i,j,k} - \frac{1}{N_{i,j}^{\text{vacancy}}} \sum_{k=1}^{N_{i,j}^{\text{vacancy}}} Y_{i,j,k} \right)^2 + \left( Z_{i,j,k} - \frac{1}{N_{i,j}^{\text{vacancy}}} \sum_{k=1}^{N_{i,j}^{\text{vacancy}}} Z_{i,j,k} \right)^2 \right\}^{1/2}, \quad (1)$$

где  $i, j, k$  — номер каскада, субкаскада и вакансии соответственно;  $N_{i,j}^{\text{vacancy}}$  — количество вакансий в субкаскаде  $i, j$ .

Поскольку в пределах  $R_{i,j}$  сосредоточена основная часть вакансий субкаскада, эту величину можно считать его радиусом. Форма субкаскада при этом представляет собой цилиндр радиусом  $R_{i,j}$  и высотой  $\Delta X$ . Среднюю плотность индивидуального каскада столкновений  $f_{av}$  можно тогда рассчитать по очевидной формуле:

$$f_{av} = \frac{1}{n^{at}} \frac{\sum_{i=1}^{N^{\text{cascade}}} \sum_{j=1}^{N_i^{\text{subcascade}}} N_{R_{i,j}}^{\text{vacancy}}}{\sum_{i=1}^{N^{\text{cascade}}} \sum_{j=1}^{N_i^{\text{subcascade}}} \pi R_{i,j}^2 \Delta X}, \quad (2)$$

где  $N^{\text{cascade}}$  — полное число рассмотренных каскадов,  $N_i^{\text{subcascade}}$  — число субкаскадов в каскаде  $i$ ,  $N_{R_{i,j}}^{\text{vacancy}}$  — количество вакансий в цилиндре радиуса  $R_{i,j}$  внутри субкаскада  $i, j$ ;  $\pi R_{i,j}^2 \Delta X$  — объем цилиндра.

Второй подход был описан в работе [23], где и был использован. В этом случае для каждой вакансии в каскаде было посчитано количество соседних вакансий  $N_v$ , т.е. вакансий, лежащих в пределах сферы с центром в данной вакансии и радиусом  $R_c$ . Для каждой глубины число соседних вакансий усреднялось сначала по всем вакансиям, расположенным в окрестности 2.5 нм по оси  $X$ , а затем по всем каскадам. Плотность каскада столкновений на определенной глубине вычислялась как итоговое среднее количество соседних вакансий на данной глубине, поделенное на объем сферы  $(4/3)\pi R_c^3$ .

Еще в 1980-х было показано, что распределение атомных смещений в каскаде столкновений может быть описано в рамках фрактальной геометрии [24,25]. Данный подход к расчету плотности каскадов как раз позволяет произвести расчет фрактальной размерности каскадов в случае, если геометрия каскада имеет фрактальную природу. Для SiC таким методом была показана взаимосвязь фрактальных параметров каскадов с экспериментальными данными по накоплению повреждений при облучении импульсными пучками атомарных ионов [23].

Параметры облучений  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 

Ион	Энергия		Доза на 1 DPA $10^{14} \text{ см}^{-2}$	Плотность тока	
	кэВ	кэВ/а.е.м.		$10^{11} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$	$10^{-3} \text{ DPA/с}$
F	25	1.3	11.4	27.6	2.41
P	40	1.3	6.28	15.1	2.41
PF <sub>4</sub>	140	1.3	1.97	4.7	2.41

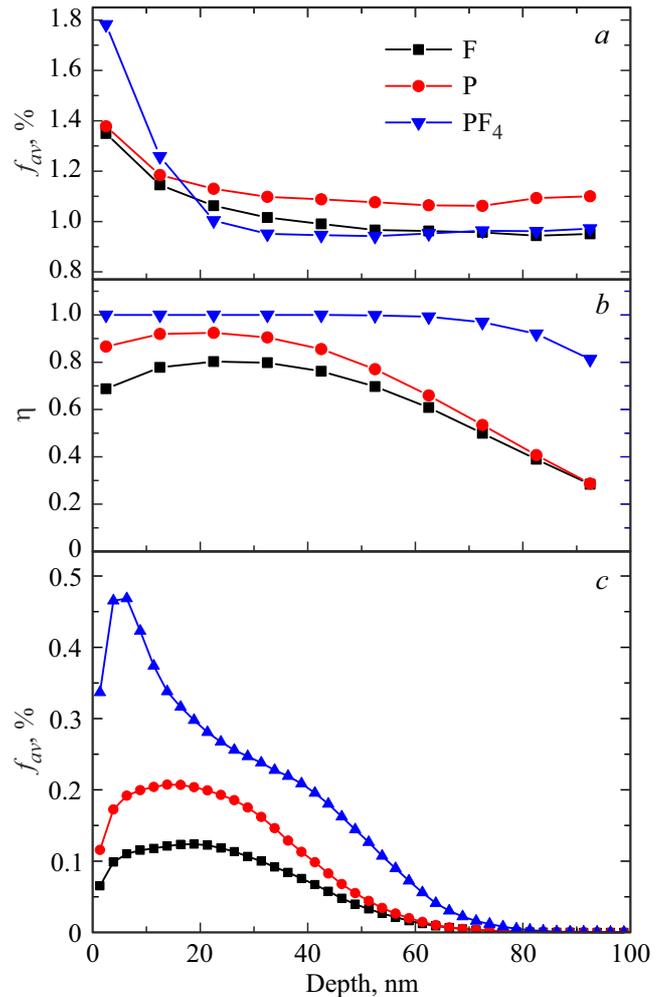
Тем не менее в общем случае такая связь на данный момент практически не изучена.

Определить, имеет ли каскад фрактальную природу, можно, варьируя параметр  $R_c$ . Если распределение вакансий представляет собой фрактальную структуру, то количество соседних вакансий  $N_v$  должно зависеть от радиуса сферы  $R_c$  по закону  $N_v \sim (R_c)^D$ , где  $D$  — фрактальная размерность, причем  $D < 3$ . Соответственно, при построении зависимости средней величины  $N_v$  от  $R_c$  в логарифмическом масштабе можно ожидать, что зависимость на графике будет иметь линейный характер, а наклон прямой позволит определить величину  $D$ .

Экспериментальные данные по накоплению радиационных повреждений были получены путем облучения моноклинных кристаллов  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ , выращенных по методу HVPE и облученных ионами  $\text{F}^+$ ,  $\text{P}^+$ ,  $\text{PF}_4^+$  на имплантере 500 kV HVEE. Все имплантации проводились при комнатной температуре под углом  $7^\circ$  для избежания эффектов каналирования. Параметры облучений представлены в таблице. Дозы и плотности тока, выраженные в смещениях на атом (displacements per atom — DPA) и DPA/с соответственно, сохранялись одинаковыми для всех типов ионов. Это обеспечивает корректное сравнение радиационных повреждений, формируемых атомарными и кластерными ионами, поскольку единственное различие между всеми случаями облучения заключается в различной плотности каскадов столкновений [9]. Результирующее разупорядочение измерялось по методу RBS/C на той же установке. Спектры RBS/C обрабатывались по одному из общепринятых методов [26] для получения профилей относительного разупорядочения по глубине.

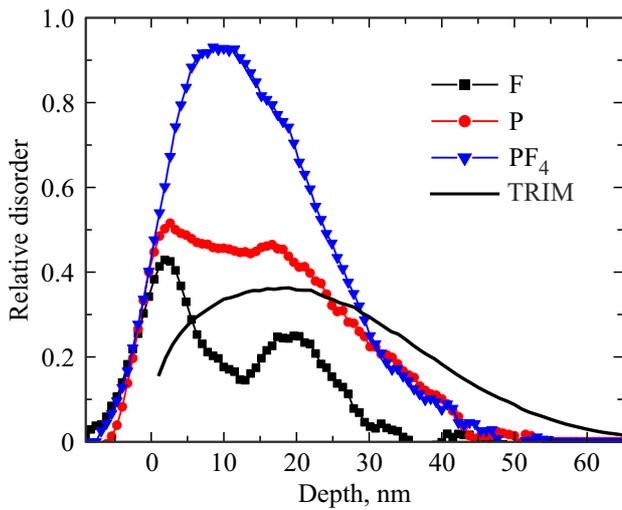
### 3. Результаты и обсуждение

На рис. 1 представлены рассчитанные по обоим методам плотности каскадов в зависимости от расстояния от поверхности. Как уже отмечалось выше, для предсказания эффективности радиационного повреждения имеет смысл говорить лишь об относительном различии плотностей для различных ионов в рамках одной методики расчета. Кроме того, следует учитывать тот факт, что, как хорошо видно из рис. 1, *b*, вероятность генерации на данной глубине каскада ( $\eta$ ) может быть меньше единицы. Тогда каскад там просто не образуется и концентрация стабильных дефектов не возрастает.



**Рис. 1.** Зависимости плотности каскадов столкновений от глубины в мишени, рассчитанные (а) по методу [6], рассматривающему формирование субкаскадов (b) доля ионов, формирующих по меньшей мере один субкаскад в слое, соответствующем данной глубине (c) плотности каскадов, рассчитанные по методу [23], рассматривающему соседние вакансии в сфере фиксированного радиуса (здесь  $R_c = 8 \text{ нм}$ ).

Для обоих методов в приповерхностной области наблюдается более высокая плотность каскадов для кластерных ионов  $\text{PF}_4$  по сравнению с атомарными ионами. Это естественным образом объясняется эффективным перекрытием индивидуальных каскадов составных частей молекулярного иона вблизи поверхности. Данные



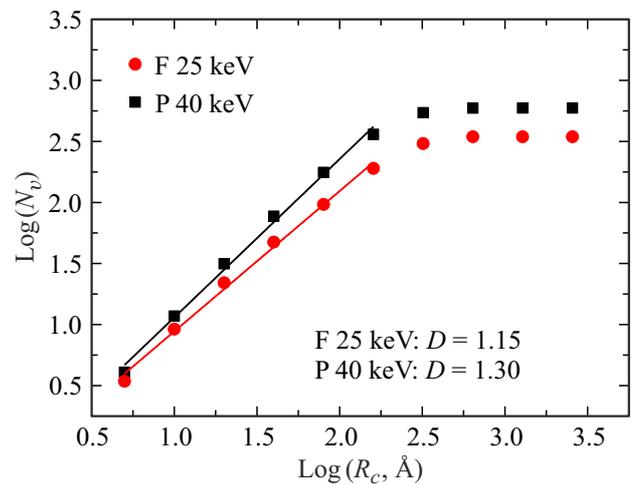
**Рис. 2.** Профили относительного разупорядочения в  $\beta-Ga_2O_3$  после облучения ионами F 25 кэВ, P 40 кэВ,  $PF_4$  140 кэВ дозой 0.441 DPA, а также профиль генерации вакансий (TRIM) для P 40 кэВ (в произвольном масштабе по оси Y).

расчеты находятся в согласии с профилями относительного разупорядочения, основанными на экспериментальных данных, приведенными на рис. 2. Эти профили, сформированные при облучении  $\beta-Ga_2O_3$  эквивалентными дозами F, P,  $PF_4$ , имеют два максимума разупорядочения — поверхностный и объемный. В то время как первый формируется в результате диффузии к поверхности подвижных точечных дефектов, генерированных тормозящимися ионами, имеющей место на стадии образования стабильных нарушений. Глубина формирования объемного максимума соответствует максимуму генерации вакансий. Для приповерхностного пика наблюдается так называемый „молекулярный эффект“, т.е. усиление скорости накопления радиационного повреждения при облучении материала молекулярными ионами по сравнению с облучением атомарными [17,18]. Поскольку в рамках представления о бинарных столкновениях для всех облучений количество сгенерированных первичных дефектов сохранялось одинаковым, наблюдаемые различия должны быть вызваны нелинейными эффектами, вызванными различием в плотности индивидуальных каскадов.

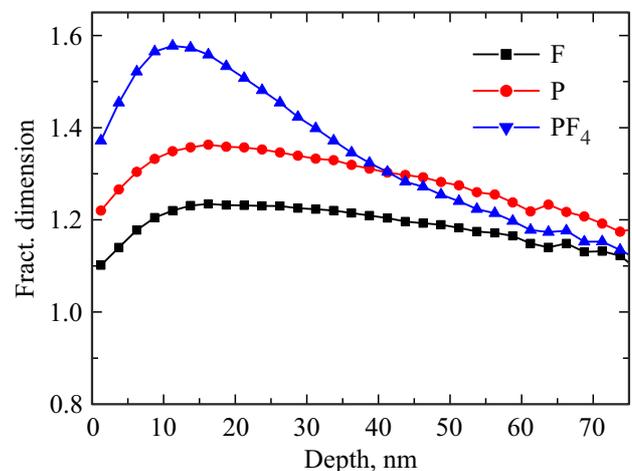
Различие в накоплении повреждений между атомарными ионами различной массы (F и P) в рамках подхода, рассматривающего субкаскады, происходит за счет двух факторов: 1) большей плотности каскадов для более тяжелого иона P; 2) большей доли ионов, образующих по меньшей мере один субкаскад, в случае иона P. Оба рассматриваемых метода позволяют в определенной мере предсказать результирующие радиационные повреждения путем расчета параметров индивидуальных каскадов.

Проверить, имеет ли геометрия рассматриваемых распределений смещений фрактальную природу, можно,

построив зависимость логарифма среднего числа вакансий от логарифма параметра  $R_c$  (рис. 3). Как было показано выше, линейность такой зависимости говорит о возможности рассмотрения каскадов как имеющих фрактальную геометрию, причем наклон прямых соответствует фрактальной размерности  $D$ . На рис. 4 приведены зависимости рассчитанных фрактальных размерностей каскадов для рассматриваемых ионов на различной глубине. Интересно, что аналогично плотности каскадов величина фрактальной размерности при облучении молекулярными ионами оказывается выше у поверхности по сравнению с облучением атомарными ионами. Это свидетельствует о возможности использования фрактальной размерности индивидуальных каскадов столкновений как параметра, позволяющего предсказывать величину накопления повреждений в полупроводниках.



**Рис. 3.** Зависимость среднего числа соседних вакансий от величины параметра  $R_c$  на глубине 16 нм.



**Рис. 4.** Зависимость фрактальной размерности каскадов столкновений от глубины.

## 4. Заключение

Был проведен анализ параметров и геометрии каскадов столкновений в  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в случае облучения атомарными ионами F и P и молекулярными ионами PF<sub>4</sub> с энергиями 1.3 кэВ/а.е.м. Сравнение двух методов расчета параметров каскадов показало, что оба метода отражают экспериментальные данные по влиянию на накопление дефектов в оксиде галлия плотности каскадов столкновений и дают возможность оценить величину накапливаемых повреждений при облучении различными ионами. Подтверждено сильное влияние плотности каскадов столкновений на эффективность формирования устойчивых нарушений в  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Установлена фрактальность каскадов смещений для всех рассмотренных случаев и проведен расчет их фрактальных размерностей.

### Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 22-19-00166.

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] I.A. Abroyan, A.N. Andronov, A.I. Titov. *Physical Foundations of Electron- and Ion-Beam Technology* (Vysshaya Shkola, Moscow, 1984) p. 317.
- [2] W. Wesch, E. Wendler. *Ion Beam Modification of Solids: Ion-Solid Interaction and Radiation Damage* (Springer Cham, 2016).
- [3] D.A. Thompson. *Radiat. Eff.*, **56**, 105 (1981).
- [4] J.A. Davies. *Ion Implantation and Beam Processing*, ed. by J.S. Williams and J.M. Poate (N.Y., Academic, 1984).
- [5] L.M. Howe, M.H. Rainville, H.K. Haugen, D.A. Thompson. *Nucl. Instrum. Meth.*, **170**, 419 (1980).
- [6] S.O. Kucheyev, A.Yu. Azarov, A.I. Titov, P.A. Karasev, T.M. Kuchumova. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **42**, 085309 (2009).
- [7] A.I. Titov, S.O. Kucheyev, V.S. Belyakov, A.Yu. Azarov. *J. Appl. Phys.*, **90**, 3867 (2001).
- [8] A.Yu. Azarov, A.I. Titov. *Semiconductors*, **41** (1), 5 (2007).
- [9] A.I. Titov, A.Yu. Azarov, L.M. Nikulina, S.O. Kucheyev. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B*, **B256**, 207 (2007).
- [10] J.B. Wallace, L.B. Bayu Aji, L. Shao, S.O. Kucheyev. *Phys. Rev. Lett.*, **120**, 216101 (2018).
- [11] A.Yu. Azarov, A.I. Titov, P.A. Karasev, A. Hallen. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B*, **B267**, 1247 (2009).
- [12] L.B. Bayu Aji, J.B. Wallace, S.O. Kucheyev. *Sci. Rep.*, **7**, 44703 (2017).
- [13] A.Yu. Azarov, S.O. Kucheyev, A.I. Titov, P.A. Karasev. *J. Appl. Phys.*, **102**, 083547 (2007).
- [14] A.Yu. Azarov, A.I. Titov, P.A. Karasev, S.O. Kucheyev, A. Hallén, A.Yu. Kuznetsov, B.G. Svensson, A.P. Pathak. *Vacuum*, **84**, 1058 (2010).
- [15] P.A. Karasev, K.V. Karabeshkin, A.I. Titov, Mohammad W. Ullah, A. Kuronen, F. Djurabekova, K. Nordlund, G.M. Ermolaeva, V.B. Shilov. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **50**, 505110 (2017).
- [16] A.I. Titov, P.A. Karasev, V.S. Belyakov, K.V. Karabeshkin, A.V. Arkhipov, S.O. Kucheyev, A.Yu. Azarov. *Vacuum*, **86**, 1638 (2012).
- [17] П.А. Карасев, К.В. Карабешкин, А.И. Стручков, А.И. Печников, В.И. Николаев, В.Д. Андреева, А.И. Титов. *ФТП*, **56** (9), 882 (2022).
- [18] K.V. Karabeshkin, A.I. Struchkov, A.I. Titov, A.Yu. Azarov, D.S. Gogova, P.A. Karasev. *Int. Youth Conf. on Electronics, Telecommunications and Information Technologies* [(Springer Proceedings in Physics, **268**, Springer, Cham, 2022)].
- [19] F. Shi, H. Qiao. *Nano Select, Preparations, properties and applications of gallium oxide nanomaterials — A review*, **3**, 348 (2022).
- [20] S.J. Pearton, F. Ren, M. Tadjer, J. Kim. *J. Appl. Phys.*, **124**, 220901 (2018).
- [21] S.J. Pearton, F. Ren, M. Mastro. *Gallium Oxide. Technology, Devices and Applications* (Elsevier Inc., 2019).
- [22] J.F. Ziegler, M.D. Ziegler, J.P. Biersack. *Nucl. Instrum. Meth. B*, **268**, 1818 (2010).
- [23] J.B. Wallace, L.B. Bayu Aji, L. Shao, S.O. Kucheyev. *Sci. Rep.*, **7**, 17574 (2017).
- [24] K.B. Winterbon. *Rad. Eff.*, **60**, 199 (1982).
- [25] K.B. Winterbon, H.M. Urbassek, P. Sigmund, A. Gras Marti. *Phys. Scripta*, **36**, 689 (1987).
- [26] K. Schmid. *Rad. Eff.*, **17**, 201 (1973).

Редактор Г.А. Оганесян

### Analysis of individual collision cascade parameters during irradiation of Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> by atomic and molecular ions

A.I. Struchkov, K.V. Karabeshkin, P.A. Karasev, A.I. Titov

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, 195251 St. Petersburg, Russia

**Abstract** Collision cascade density is one of the most important parameters that determine radiation damage accumulation in semiconductors under ion bombardment. We perform calculation of collision cascade parameters formed in  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> by irradiation with 1.3 keV/amu atomic F, P, and molecular PF<sub>4</sub> ions using two different methods: the method considering sub-cascade formation, and by calculation an average number of vacancies in spheres of fixed radius. The calculated results are compared with experimental data on damage accumulation in  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> under irradiation with aforementioned ions. It is shown that both methods qualitatively predict the effect of collision cascade density on radiation damage accumulation in gallium oxide. Fractal nature of cascades formed in  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> is established, corresponding fractal dimension is calculated.