Моделирование постимплантационного отжига нестехиометрического диоксида кремния при облучении ионами кремния

Е.В. Окулич1), Д.И.Тетельбаум1), В.И. Окулич2)

1) ННГУ им. Н. И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

2) НИУ филиал РАНХиГС, Нижний Новгород, Россия

Методом молекулярной динамики исследован процесс атомной перестройки SiO1.7 при облучении ионами Si+ с энергией 20 кэВ и дозой 1\*1015см-2.

В расчете рассматривался кластер, изначально содержащем 11616 атомов Si и O. Затем проводилось насыщение его объема вакансиями кислорода, обеспечивающее заданную стехиометрию.

После чего кластер насыщался междоузельными атомами Si, кислородными и кремниевыми вакансиями в соответствии с выбранными условиями облучения. При этом использовались данные, полученные с помощью программы SRIM. Далее проводилась процедура релаксации атомов при двух температурах: 900К и 1500К.

Расчет локальных плотностей и радиальной функции распределения позволил обнаружить образование зародышей нанокластеров Si [1].

ЛИТЕРАТУРА

1. Окулич Е.В., Окулич В.И., Тетельбаум Д.И., //, ПЖТФ, 2020, т. 1, с. 24.