

Аннотация

Первопринципное моделирование дефектообразования при ионном облучении сложных полупроводников, в том числе Ga_2O_3 , требует слишком больших компьютерных ресурсов. Решение этой проблемы было бы облегчено при использовании метода молекулярной динамики (МД). Нами разработана оригинальная методика МД расчетов эволюции системы дефектов при термическом отжиге ионно-облученных слоев с учетом исходных данных о дефектообразовании, полученных с помощью программы SRIM. Она апробирована на примере нестехиометрического оксида кремния $SiO_{1.7}$, облученного ионами Si^+ . Фиксируемые для разных времен отжига атомные координаты использовались для визуализации структуры, расчёта локальных плотностей и радиальной функции распределения кремния и кислорода.

Результаты для температуры отжига 1500K показали образование зародышей нанокластеров Si для экстремально малых времен отжига – порядка 100 нс, что согласуется с гипотезой, предложенной в экспериментальной работе [1].

Введение

Цель

1. Апробация результатов расчетов в SRIM в качестве исходных данных для МД моделирования процессов отжига дефектной структуры.
2. Оценить время относительной стабилизации структуры $\alpha-SiO_2$ при постимплантационном отжиге

Объект исследования

Нестехиометрический аморфный диоксид кремния $SiO_{1.7}$, облученный ионами Si^+ с энергией 20 кэВ и дозой 10^{17} см^{-2} при $T_{отж} = 1500K$.

Результат

Обнаружено образование нанокластеров для времени 100 нс.

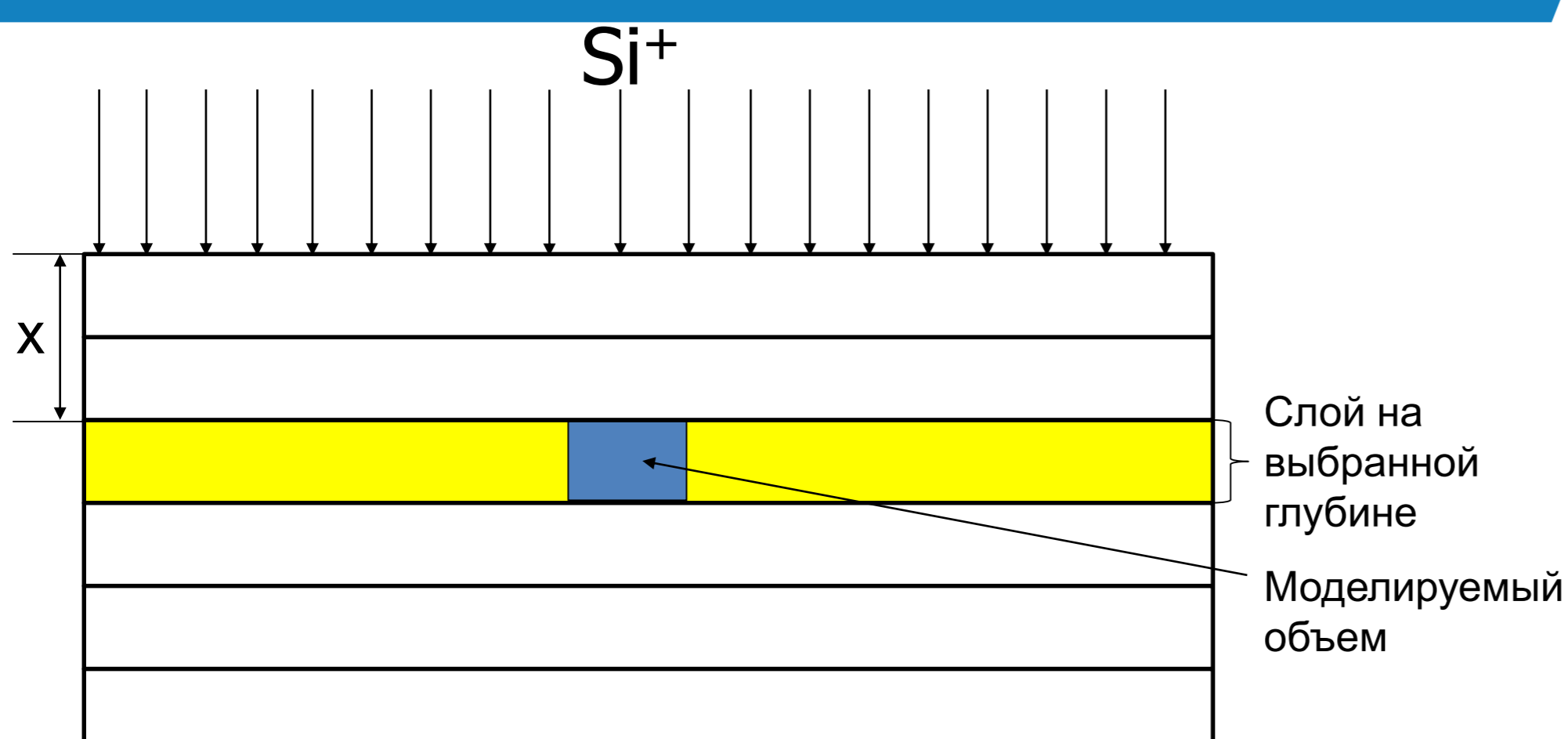
Используемые инструменты

- A. SRIM
- B. LAMMPS
- B. Оригинальные программы анализа структуры диоксида кремния

Общая схема расчета (на примере SiO_2)



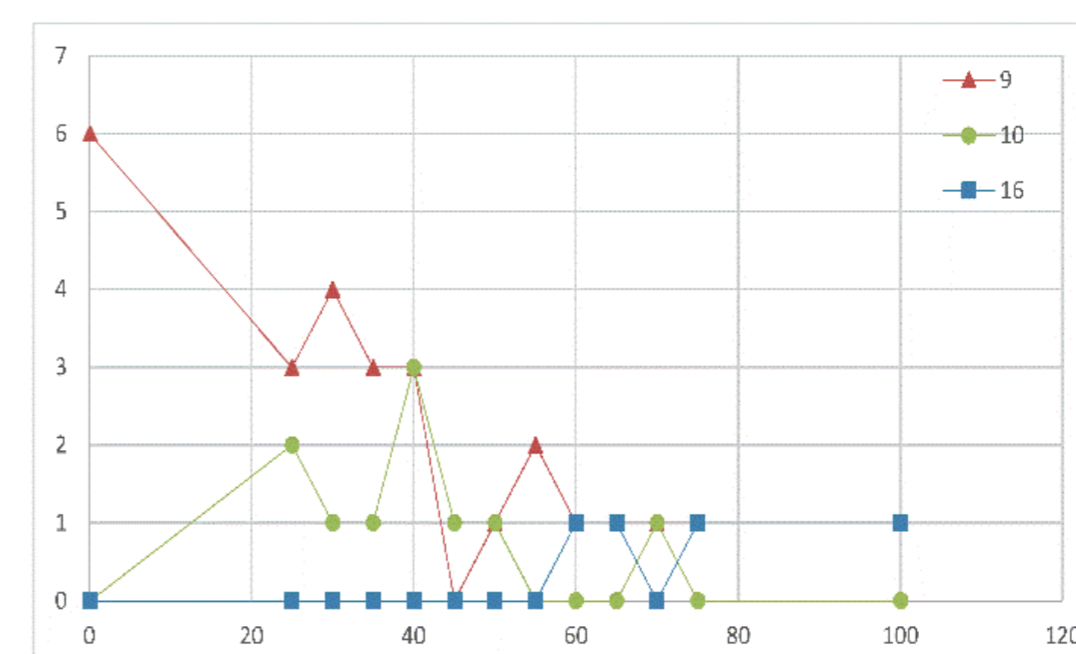
Использование SRIM



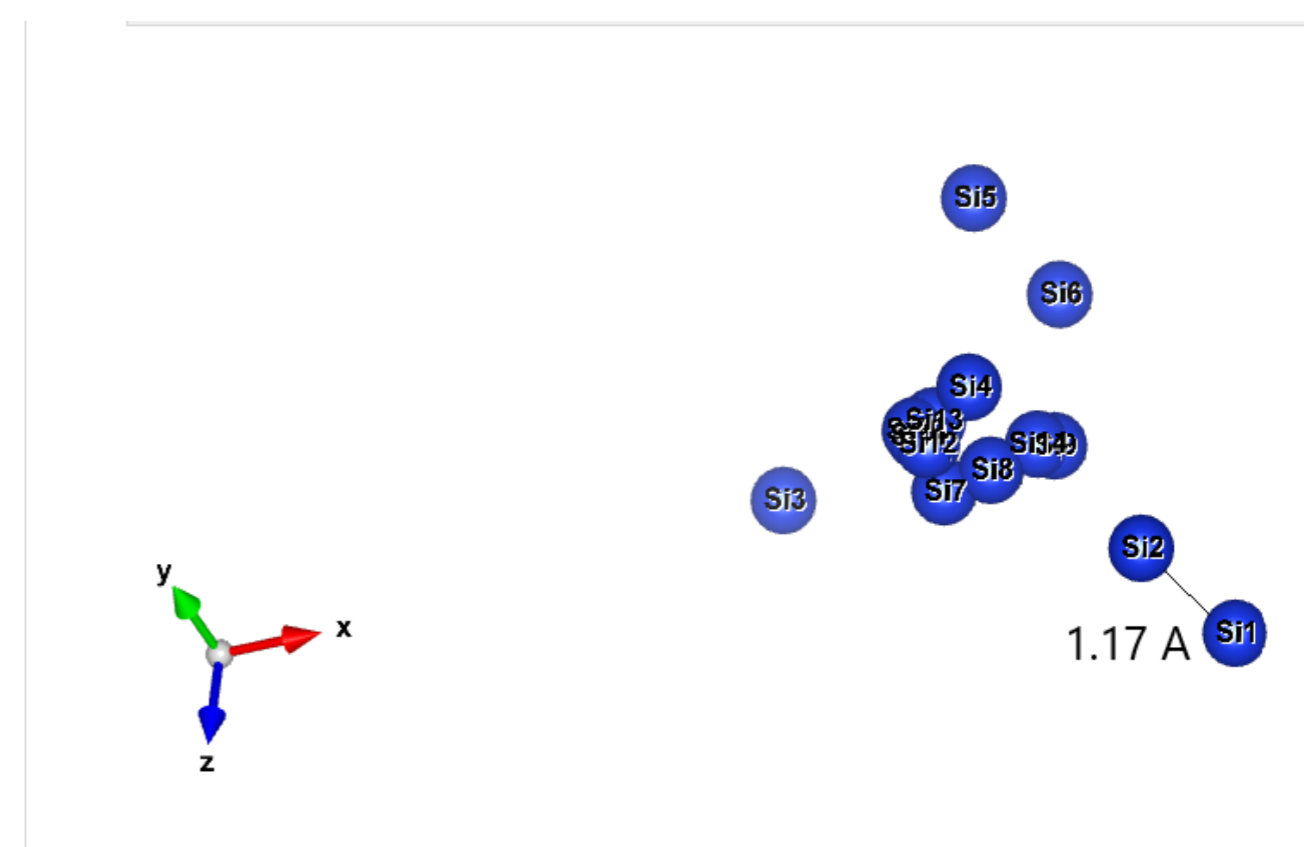
Файл *VACANCY* – концентрация вакансий Si и O
Файл *RANGE* – концентрация смещенных Si и O (recoil-атомов), число внедренных ионов Si на глубину x

X = 250Å выбрана в области максимальной концентрации ионов Si

Примеры представления результатов

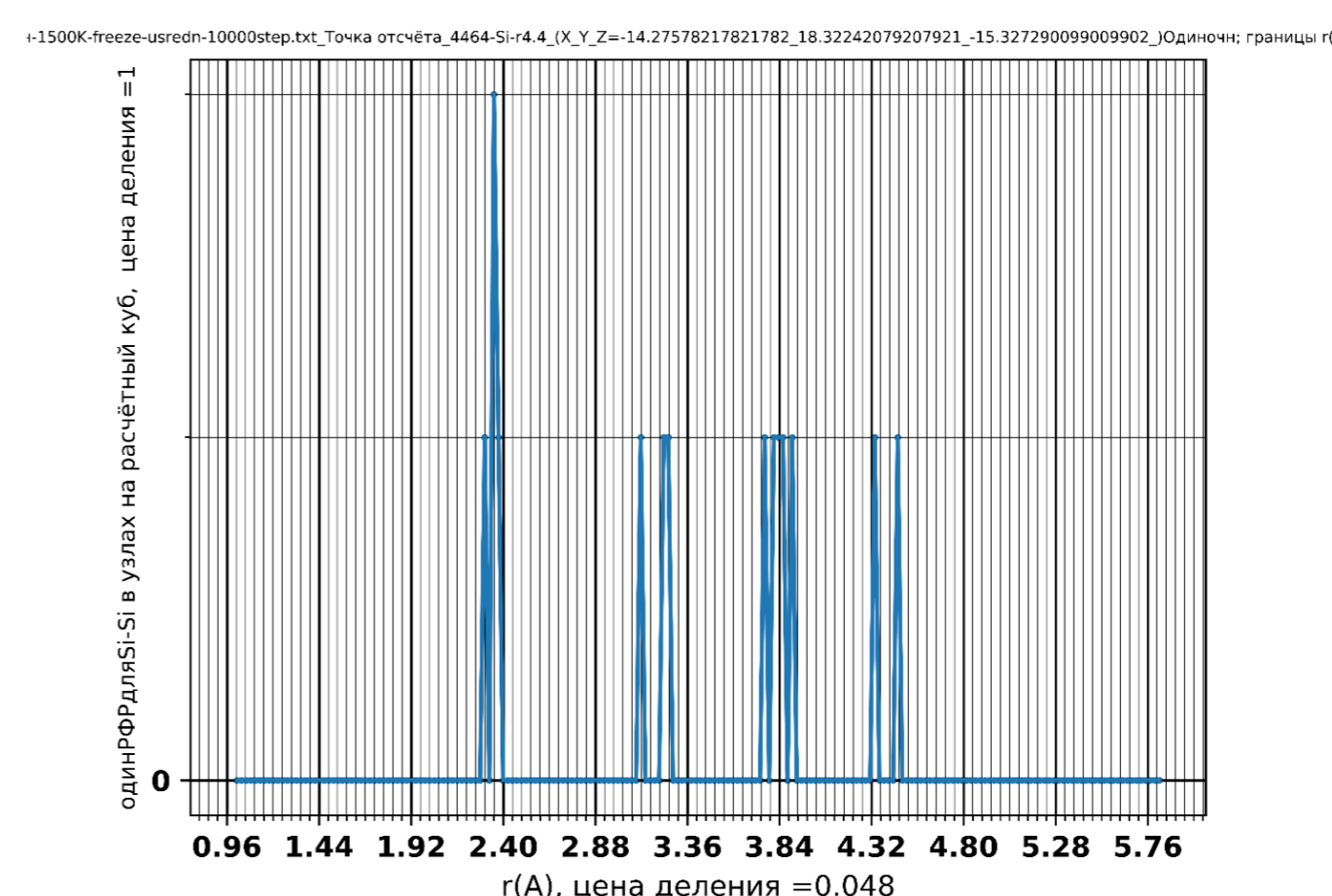


Временная зависимость числа кластеров, содержащих разное число (2, 5, 7, 9, 10, 16) атомов кремния.



Изменение положения во времени атома - центра сферического (радиус 4.4 Å) кластера, включающего (после 60 нс) 16 атомов Si. Номер на маркировке атома соответствует временам отжига, представленным в таблице ниже

Номер	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
Время, нс	0	0.1	25	30	35	40	45	50	55	60	65	70	75	100



Радиальная функция распределения расстояний Si-соседей от центрального Si-атома сферического кластера с Si=16 для времени отжига = 65 нс

Выводы

При условиях наличия потенциала межатомного взаимодействия и мощных вычислительных ресурсов предложенная методика позволяет исследовать влияние различных параметров ионной имплантации и постимплантационного отжига на структуру зоны облучения

Список литературы

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

Работа выполнена при поддержке РФФИ (Грант № 19-57-80011).