



## Исследование аморфизации кремния ионами ксенона методами просвечивающей электронной

О.В. Подорожний<sup>1</sup>, А.В. Румянцев<sup>1</sup>, Н.И. Боргардт<sup>1</sup>, Д.К. Миннебаев<sup>2</sup>, А.Е. Иешкин<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский университет «МИЭТ», Москва, Зеленоград

<sup>2</sup>Московский государственный университет им М.В. Ломоносова, Москва

e-mail: lemi@miee.ru

### Введение

Ускоренные ионы широко применяются для модификации поверхности различных материалов, например, с использованием метода фокусированного ионного пучка (ФИП). Хотя наиболее распространёнными в системах с ФИП являются ионы галлия, с развитием плазменных источников ионов все более актуальными в таких применениях становятся ионы инертных газов, в особенности ксенона Хе [1]. Исследование нарушенного при ионном воздействии слоя образца представляет высокий интерес для совершенствования приёмов создания и модификации различных структур, поскольку состояние обработанной поверхности имеет сильное влияние на характеристики формируемых объектов.

### Постановка задачи

**Цель работы:** исследование аморфизованного при облучении ионами Хе<sup>+</sup> слоя монокристаллического Si.

**Поставленные задачи:**

- Провести исследование облучённого ионами Хе<sup>+</sup> с энергиями 5 и 8 кэВ образца Si методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и рентгеновского микроанализа.
- Определить толщины аморфизованных ионами Хе<sup>+</sup> слоёв Si.
- Провести моделирование взаимодействия ионов Хе<sup>+</sup> с подложкой Si методами молекулярной динамики и Монте-Карло с применением модели критической плотности дефектов.

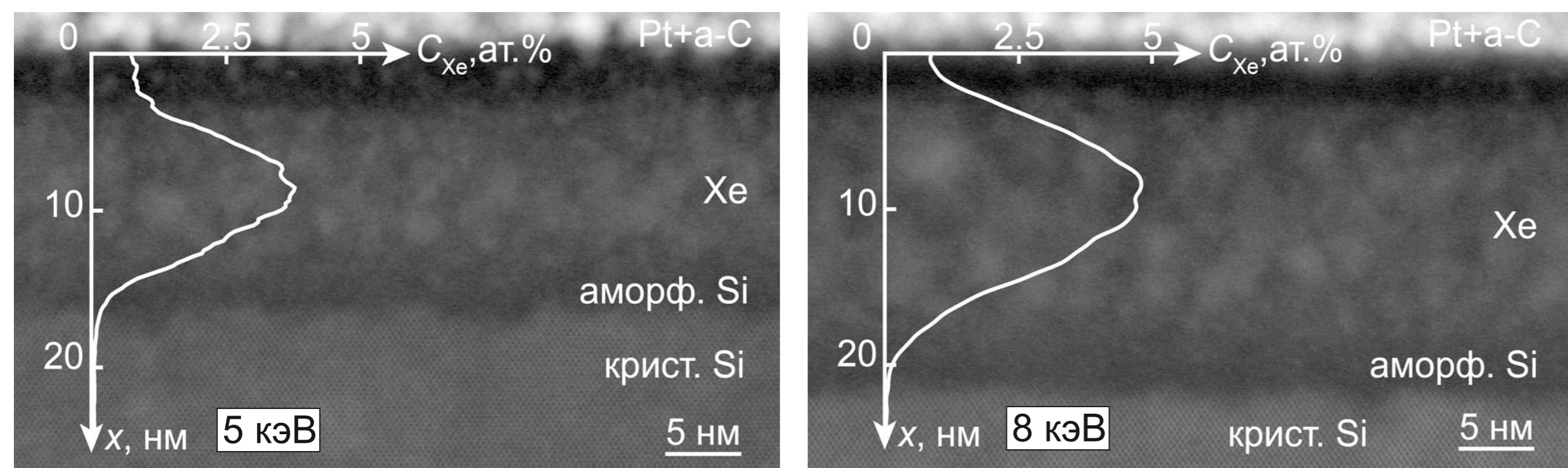
### Изготовление и экспериментальное исследование тестовых структур

Образец монокристаллического Si(001) облучался ионами Хе<sup>+</sup> с энергиями 5 и 8 кэВ и дозой около 10<sup>16</sup> см<sup>-2</sup> в условиях сверхвысокого вакуума на кафедре физической электроники МГУ им. М.В. Ломоносова. Тонкие фольги поперечного сечения для исследования методами ПЭМ изготавливались в электронно-ионном микроскопе Helios Nanolab 650 методом *in situ* lift-out [2].

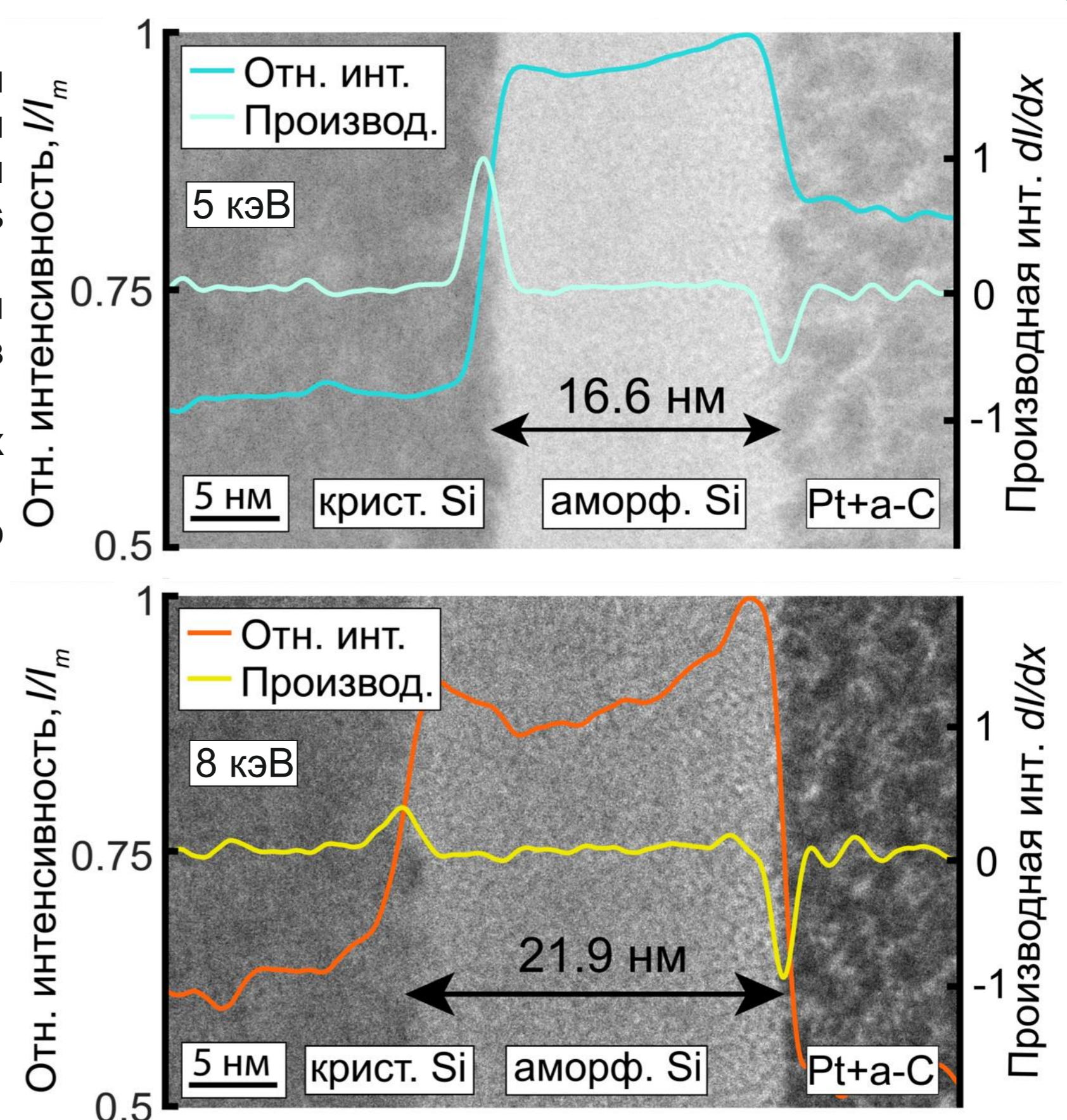
Исследование полученных образцов проводилось в просвечивающем электронном микроскопе Titan Themis 200 при ускоряющем напряжении 200 кВ методами ПЭМ в режиме светлого поля, ПРЭМ и энергодисперсионного рентгеновского микроанализа.

Толщины аморфизованных слоёв были получены путём обработки светлопольных ПЭМ-изображений. Найденные величины составили 16,6±1,8 и 21,9±1,9 нм.

При помощи метода ПРЭМ в приповерхностной области образца установлено образование кластеров атомов Хе, размеры которых были оценены в 1,5–2 и 3–4 нм.



ПРЭМ-изображения приповерхностных областей образцов Si с наложенными на них профилями концентрации имплантированных атомов Хе по глубине образца, полученных методом энергодисперсионного рентгеновского микроанализа.



Светлопольные ПЭМ-изображения приповерхностных областей образцов Si.

### Моделирование ионного облучения методами молекулярной динамики и Монте-Карло

Моделирование облучения образца Si ионами Хе<sup>+</sup> методом молекулярной динамики выполнялось в программном пакете LAMMPS. Потенциал взаимодействия – Tersoff-ZBL.

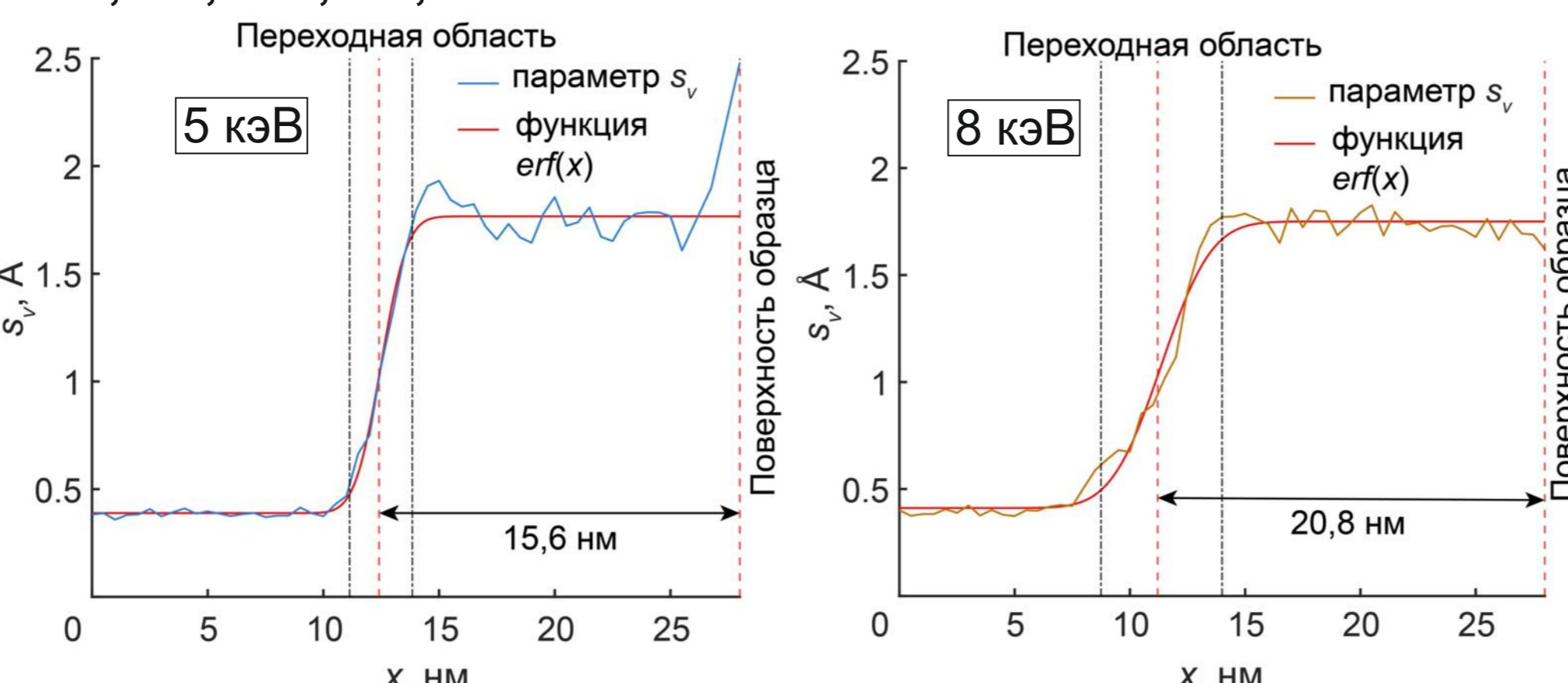
Определение толщины аморфизованного слоя Si выполнялось с помощью расчёта локального параметра порядка [3] на основе полученных в ходе моделирования атомных позиций  $r_i$ .

$$s_v(\vec{r}_i) = \left| \sum_j (\vec{r}_j - \vec{r}_i) \right|$$

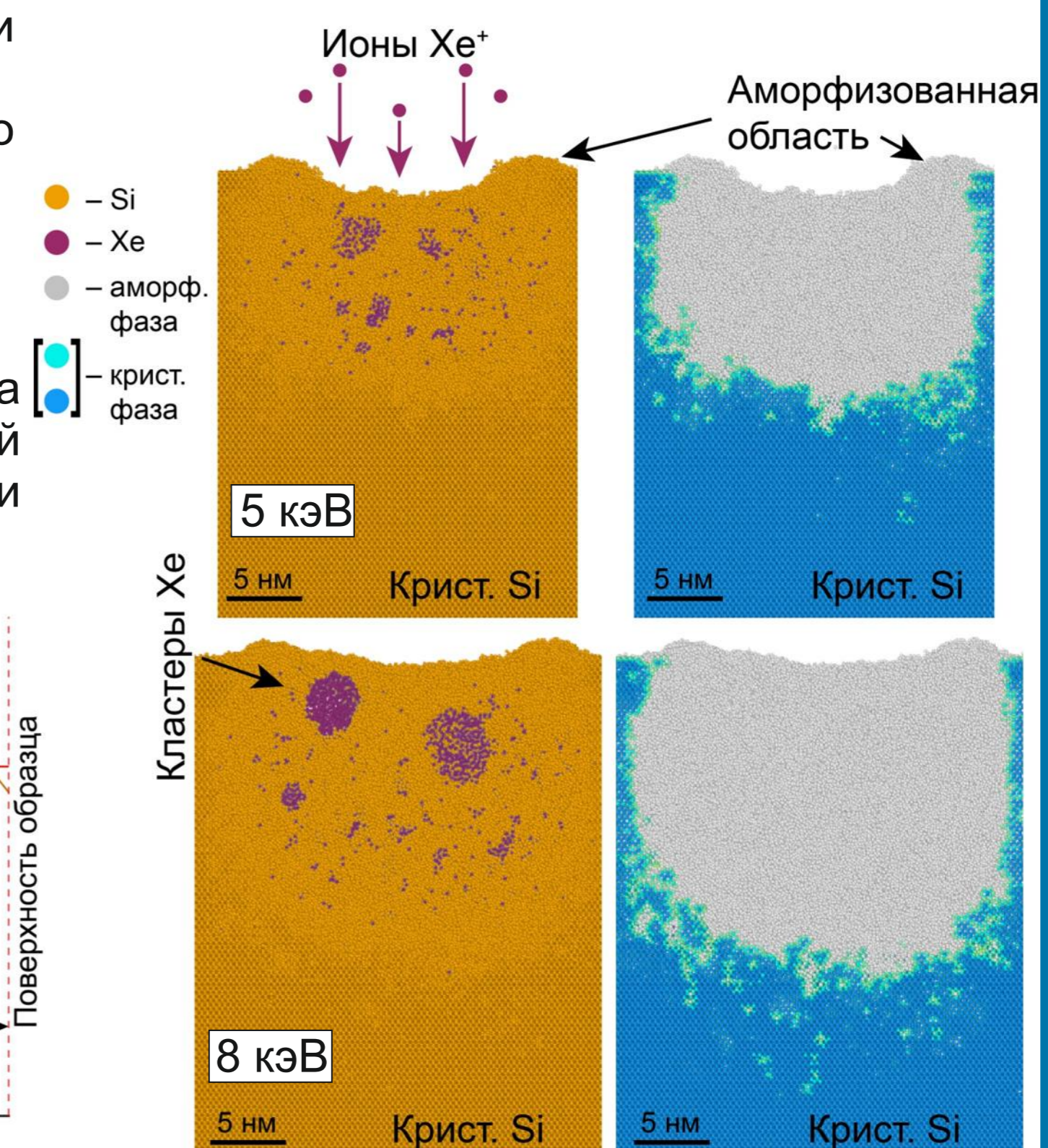
Профили локального параметра порядка были аппроксимированы функцией ошибок. Толщина аморфизованного слоя рассчитывалась от поверхности образца до середины переходной области. Полученные значения равнялись примерно 15,6 и 20,8 нм. Размеры кластеров Хе при моделировании составили около 1,5–2,5 и 3,0–4,5 нм.

Моделирование методом Монте-Карло проводилось в пакете SDTrimSP 5.07 в статическом режиме с использованием потенциала KrC и с применением модели критической плотности дефектов [4].

Полученные значения толщин аморфизованных слоёв составили примерно 14,9 и 20,8 нм.



Профили локального параметра порядка



Элементный состав и кристаллическая структура образцов после моделирования

### Литература

1. Smith N. S // MRS Buletin. 2014. V. 39. P. 329-335
2. Mayer J. // MRS bulletin. 2007 V. 32 pp. 400-407.
3. Bernstein N. // Phys. Rev. B. 1998. V. 58. P. 4579.
4. Cerva H. // J. Electrochem. Soc. 1992. V. 139. № 12. P. 3631.

### Выводы

В работе проведено экспериментальное исследование образцов монокристаллического кремния, облучённого ионами ксенона. Найденны толщины аморфизованных слоёв и оценены размеры кластеров ксенона. Полученные значения хорошо согласуются с результатами моделирования.