

## Численное моделирование тепловых процессов и влияния нагрева приповерхностных слоев кремния на накопление и диффузию титана при высокоинтенсивной импульсной ионной имплантации

*А.И. Иванова\**, *Г.А. Блейхер*, *Д.Д. Зайцев*

*National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia*

*\*bai@tpu.ru*

**Аннотация.** Рассмотрены особенности тепловых процессов и влияние импульсного нагрева приповерхностных слоев кремния на диффузионный перенос в условиях синергии высокоинтенсивной имплантации ионов титана и энергетического воздействия импульсно-периодического пучка высокой плотности мощности на поверхность с целью увеличения глубины ионного легирования за счет радиационно-стимулированной диффузии в условиях ограниченного нагрева всего образца. Приведены результаты расчётов пространственно-временного распределения температурных полей в кремнии и диффузионного переноса имплантируемой примеси под действием ионных пучков титана субмиллисекундной длительности.

**Ключевые слова:** математическое моделирование, температурные градиенты, низкоэнергетический ион, высокоинтенсивная имплантация, диффузия, кремний.

### 1. Введение

В настоящее время в промышленно развитых странах все большее внимание уделяется ионно-плазменным технологиям [1–13]. Обусловлено это тем, что с помощью пучковых ионно-плазменных технологий возможно локальное легирование определенной зоны или всей поверхности вместо изменения свойств всего объема образца. Ионная бомбардировка изменяет практически все свойства поверхности твердого тела и приповерхностного слоя. Физико-механические свойства поверхностных и приповерхностных слоев материалов являются важнейшими факторами, определяющими долговечность и надежность обрабатываемых изделий. Метод высокоинтенсивной имплантации ионными пучками большой плотности мощности и субмиллисекундной длительности предполагает значительный импульсный нагрев приповерхностного слоя облучаемой мишени с последующим ее быстрым охлаждением [14]. Это происходит благодаря отводу тепла в материал за счет теплопроводности и импульсно-периодической радиационно-стимулированной диффузии атомов на глубины, значительно превышающие проективный пробег ионов. В статье рассмотрены особенности тепловых процессов и влияние импульсного нагрева приповерхностных слоев кремния на диффузионный перенос в условиях синергии высокоинтенсивной имплантации ионов титана и энергетического воздействия импульсно-периодического пучка высокой плотности мощности на поверхность с целью увеличения глубины ионного легирования за счет радиационно-стимулированной диффузии в условиях ограниченного нагрева всего образца.

Для решения поставленной задачи задействовано математическое моделирование тепловых и диффузионных процессов в материале, развивающихся под действием ионного пучка импульсно-периодического действия с рабочими параметрами, соответствующими техническим возможностям экспериментального оборудования [15]. Приведены результаты расчётов пространственно-временного распределения температурных полей в кремнии и диффузионного переноса имплантируемой примеси под действием ионных пучков титана субмиллисекундной длительности.

Исследования направлены на изучение массопереноса имплантированных частиц ионного пучка импульсно-частотного действия в приповерхностных слоях облучаемых изделий, которые перемещаются относительно пучка в процессе обработки. Предполагается,

что причиной значительного массопереноса частиц пучка в глубинные слои облучаемых материалов может быть усиление диффузии за счёт значительного возрастания коэффициента диффузии в течение действия импульсов тока пучка. При этом высокотемпературный разогрев, превышающий температуру рекристаллизации, затронет только самые поверхностные слои. Необходимость подобной задачи вызвана как реальными условиями экспериментов, так и требованиями к технологической обработке в условиях промышленного производства.

## 2. Параметры экспериментов и методика расчётов

### 2.1. Схема облучения и параметры обработки

Численное исследование проводилось на примере облучения квадратной кремниевой пластины со стороной 20 мм и толщиной 0.38 мм пучком ионов титана импульсно-частотного действия. При этом пластина была прикреплена к стороне держателя, имеющего форму шестигранной призмы с площадью основания 728 мм<sup>2</sup> и высотой 70 мм, и вращающегося вокруг оси, проходящей через основание, со скоростью 8.8 оборотов в минуту. Схема эксперимента представлена на Рис. 1. Параметры обработки поверхности кремниевой пластины содержатся в Таблице 1.

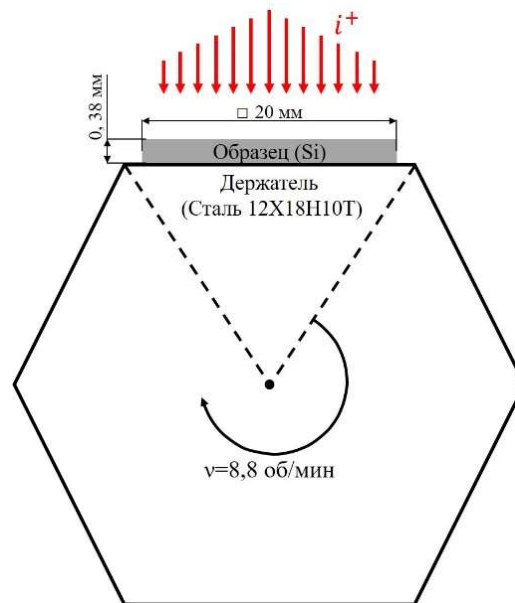


Рис. 1. Схема эксперимента.

**Таблица 1.** Параметры обработки поверхности кремниевой пластины.

$U$ , кВ	Заряд ионов	$I$ , А	$f$ , имп/с	$\tau_{имп}$ , с	$R$ , м	$J_{имп}$ , А/м <sup>2</sup>	$W_{имп}$ , Вт/м <sup>2</sup>
30	$+2q_e$	0.3	30	$450 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$3.8 \cdot 10^3$	$1.14 \cdot 10^8$

Примечание:  $U$  – ускоряющее напряжение,  $q_e$  – заряд электрона,  $I$  – ток пучка, усреднённый по импульсу,  $f$  – частота следования импульсов тока пучка,  $\tau_{имп}$  – длительность одного импульса,  $R$  – радиус поперечного сечения пучка,  $J_{имп}$  и  $W_{имп}$  – усреднённые по сечению пучка плотность тока и плотность мощности пучка.

В Таблице 2 приведены характеристики обработки поверхности образца, связанные с его движением вместе с держателем-шестигранником относительно пучка. Поверхность образца облучалась в «пакетном» режиме во время прохождения образца в зоне действия ионного пучка. Длительность каждого частотно-импульсного пакета составляла примерно 20% от периода вращения держателя.

**Таблица 2.** Временные характеристики обработки поверхности образца

$t_d, \text{с}$	$t_{нас}, \text{с}$	$V_{пучок}, \text{м/с}$	$\tau_{obl}, \text{с}$
6.8	$0.2 t_d \approx 1.4$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	0.7

Примечание:  $t_d$  – период оборота держателя,  $t_{нас}$  – длительность прохождения пучка вдоль поверхности образца в течение одного оборота держателя,  $V_{пучок}$  – скорость перемещения центра следа (поперечного сечения) пучка на поверхности образца,  $\tau_{obl}$  – длительность прохождения пучка над любым элементом поверхности образца.

## 2.2. Расчёт нагрева

Исследование теплового воздействия частотно-импульсного ионного пучка на поверхность металлического образца в случае, фиксированного в пространстве и во времени положения, представленное в работе [16] показало, что изменение температуры в образце, в том числе в его поверхностных слоях ( $T(t)$ ) можно представить как  $T(t) = T_{фон}(t) + \Delta T_{имп}(t)$ , где  $T_{фон}(t)$  – фоновая температура, полученная путем расчета нагрева по усредненной плотности мощности по времени;  $\Delta T_{имп}(t)$  – изменение температуры во всех элементах наблюдения в поверхностном слое облучаемой пластины, рассчитанное в условиях «пакетного» нагрева высокой плотности мощности. Причём значение  $T_{фон}(t)$  стабилизируется в течение некоторого времени с момента начала облучения, когда устанавливается равновесие между потоком энергии пучка, поступающим на облучаемый образец, и потоком теплового излучения с его поверхностей.

Для расчёта  $T_{фон}(t)$  была задана начальная температура в системе «держатель - пластина» 300 К и усреднённая по периоду поступления пакета импульсов плотность мощности:

$$q_{фон} = \frac{W_{имп}}{\pi R^2} f \tau_{имп} \frac{t_{нас}}{t_d}. \quad (1)$$

Моделирование импульсно-периодического нагрева образца проводилось с учетом движения центра пучка. В качестве начальных условий была взята рассчитанная на предыдущем этапе величина  $T_{фон}$ . Плотность мощности для расчета  $\Delta T_{имп}(t)$ , т.е. пакетного воздействия теплового потока на поверхность кремния в течение одного цикла сканирования, была задана как:

$$q_{имп} = \beta U j(x, t) = \beta U j_0 \exp \left[ -0,5 \left( \frac{(x - x_0(t))^2}{\omega^2} \right) \right], \quad (2)$$

где  $\beta = \text{rectl}(\text{mod}(t, 1/f))$  – функция, имитирующая импульсный нагрев пучка,  $x_0 = x_{край} + V_{пучка} \cdot t$  – координата центра пучка,  $x_{край} = -10$  мм – координата начальной точки пучка при сканировании поверхности,  $\omega^2$  – дисперсия распределения.

Распределение плотности ионного тока в (2) было взято из работы [15], так как оно является близким для параметров используемого в расчётах пучка. Численное моделирование теплового воздействия пучка на поверхность осуществлялось с использованием классического уравнения теплопроводности по схеме, предложенной в работе [17], в пакете Comsol Multiphysics [18].

С целью уменьшения времени расчета и улучшения сходимости были сделаны следующие допущения: решалась двумерная задача теплового нагрева, сечение которой проходит через центр массивной шестигранной призмы (Рис. 1); система «держатель-пластина» имела идеальный термический контакт и обладала секционированной симметрией. Нелинейные термомеханические свойства для держателя и пластины были взяты из встроенной библиотеки материалов Comsol Multiphysics.

### 2.3. Методика расчёта диффузионного переноса имплантируемой примеси

Диффузионный перенос имплантированных ионов титана в приповерхностных слоях кремниевой пластины рассчитывался на основе математической модели, описанной в [16]. Накопление примесных атомов в поверхностном слое и их распространение за счёт диффузии рассматривалось для серии импульсов пучка в течение его перемещения над любым заданным элементом на поверхности образца, поэтому функция плотности мощности внедрения примесных атомов для уравнения диффузии имела следующий вид:

$$S(z, t) = \frac{J_{имп}(t) \cdot n}{q \sqrt{2\pi \Delta R_p^2}} \exp\left(-\frac{(z - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right), \quad (3)$$

где  $J_{имп}$  – плотность тока в импульсе, усреднённая по сечению пучка,  $q$  – заряд иона,  $n$  – количество импульсов пучка в течение прохождения его следа над заданным элементом на поверхности образца (т.е. количество импульсов в одном пакете),  $R_p$  и  $\Delta R_p$  – средние проективный пробег и страгглинг проективного пробега ионов пучка.

Коэффициент диффузии зависел от температуры по уравнению Аррениуса. Данные о предэкспоненциальном множителе и энергии активации диффузии для атомарных частиц титана в кремнии взяты из работы [19].

### 3. Результаты и их обсуждение

В экспериментах по имплантации пучков ионов титана в кремниевую мишень была показана возможность глубокого ионного легирования при совмещении импульсно-периодической высокоинтенсивной имплантации и одновременного энергетического воздействия ионного пучка на поверхность [20]. Однако, чтобы более детально понять механизм диффузии в этом случае, было проведено численное моделирование.

Численное исследование динамики температуры в тонком приповерхностном слое кремневой мишени при высокоинтенсивной импульсной имплантации ионов титана проводилось при параметрах, представленных в Таблицах 1 и 2. Изменение температуры в точке наблюдения, находящейся в центре пластины при прохождении её через область воздействия частотно-импульсного ионного пучка представлено на Рис. 2.

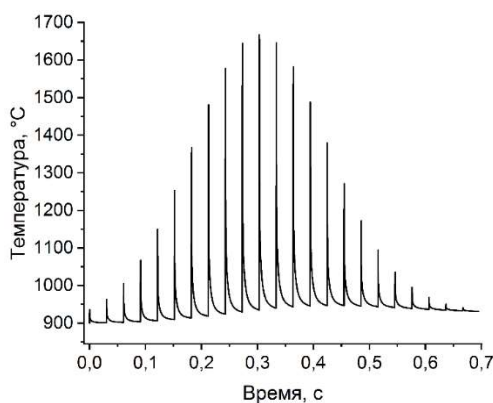


Рис. 2. Изменение температуры в точке наблюдения, находящейся в центре пластины при прохождении её через область воздействия импульсно-частотного ионного пучка.

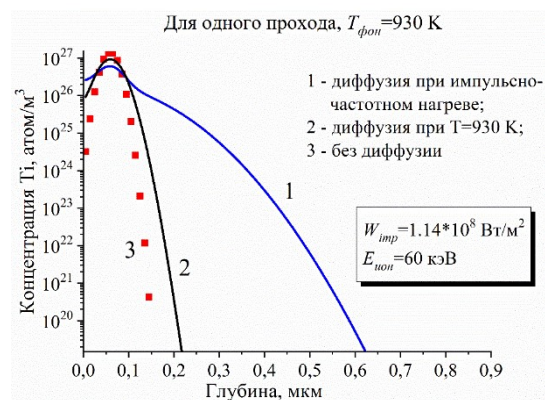


Рис. 3. Распределение концентрации примеси по глубине кремниевых образцов, закреплённого на вращающемся держателе, при имплантации атомов титана в течение одного прохода пучка над заданным элементом наблюдения на облучаемой поверхности.

Время  $t = 0$  с соответствует моменту начала прохода следа пучка над заданной точкой наблюдения на поверхности облучаемого образца. При заданных параметрах пучка на фоне

установившейся температуры  $T_{фон} = 930$  К в течение действия импульса тока максимальная температура на поверхности достигает 1660 К. При этом расчёты показали, что в объёмных слоях облучаемой системы температура практически остаётся равной  $T_{фон}$ .

Расчёт концентрационных профилей имплантированной примеси с параметрами облучения, содержащимися в Таблицах 1 и 2, показан на Рис. 3.

Из рисунка видно, что глубина залегания примеси за счёт диффузионного переноса, вызванного импульсно-частотным нагревом, существенно возросла по сравнению с глубиной имплантации и составила 620 нм. Кроме того, именно возрастание температуры в самых поверхностных слоях облучаемого образца в течение действия импульсов тока привело к заметному усилению внедрения в кремний имплантируемых атомов титана. Наблюдается значительное почти в 3 раза увеличение глубины распределения имплантируемых атомов титана в случае частотно-импульсного воздействия пучка на поверхность по сравнению с их распределением при фиксированной температуре на поверхности образца (Рис. 3, кр. 1).

#### 4. Заключение

Рассмотрены особенности тепловых процессов и влияние импульсного нагрева приповерхностных слоев кремния на диффузионный перенос в условиях синергии высокоинтенсивной имплантации ионов титана и энергетического воздействия импульсно-периодического пучка высокой плотности мощности на поверхность с целью увеличения глубины ионного легирования за счет радиационно-стимулированной диффузии в условиях ограниченного нагрева всего образца. Приведены результаты расчётов пространственно-временного распределения температурных полей в кремнии и диффузионного переноса имплантируемой примеси под действием ионных пучков титана субмиллисекундной длительности. Показано, что глубина залегания примеси за счёт диффузионного переноса, вызванного импульсно-частотным нагревом, существенно возросла по сравнению с глубиной имплантации.

#### Благодарность

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-79-10061, <https://rscf.ru/project/22-79-10061>.

#### 5. Список литературы

- [1] J.S. Williams, J.M. Poate, *Ion Implantation and Beam Processing*, Orlando: Academic, 1984.
- [2] Ф.Ф. Комаров, *Ионная имплантация в металлы*, Москва: Металлургия, 1990.
- [3] Yu.P. Sharkeev, N.V. Girsova, E.V. Kozlov, O.B. Perevalova, I.G. Brown, X.Y. Yao, Dislocation structure in coarse-grained copper after ion implantation, *Nucl. Instr. Methods Phys. Res. B*, vol. **106**, 532, 1995; doi: 10.1016/0168-583X(96)80034-6
- [4] I.A. Kurzina, E.V. Kozlov, Yu.P. Sharkeev, A.I. Ryabchikov, I.B. Stepanov, I.A. Bozhko, M.P. Kalashnikov, D.O. Sivin, S.V. Fortuna. Influence of ion implantation on nanoscale intermetallic-phase formation in Ti–Al, Ni–Al and Ni–Ti systems, *Surf. Coat. Technol.*, vol. **201**, 8463, 2007; doi: 10.1016/j.surfcoat.2006.02.062
- [5] J.M. Poate, G. Foti, D.C. Jacobson, *Surface Modification and Alloying by Laser, Ion, and Electron Beams*. Berlin: Springer, 1983.
- [6] A. Shanaghi, P.K. Chu, Enhancement of mechanical properties and corrosion resistance of NiTi alloy by carbon plasma immersion ion implantation, *Surf. Coat. Technol.*, vol. **365**, 52, 2019; doi: 10.1016/j.surfcoat.2018.04.027

- 
- [7] P. Budzyński, M. Kaminski, M. Turek, M. Wiertel. Impact of nitrogen and manganese ion implantation on the tribological properties of Stellite 6 alloy, *Wear*, vol. **456**, 203360, 2020; doi: 10.1016/j.wear.2020.203360.
- [8] A.I. Ryabchikov, D.O. Sivin, O.S. Korneva, I.V. Lopatin, P.S. Ananin, N.A. Prokopenko, Y.K. Akhmadeev, High-current-density gas ion ribbon beam formation, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A*, vol. **906**, 56, 2018; doi: 10.1016/j.nima.2018.07.088
- [9] G. E. Ozur, D. I. Proskurovsky, Generation of low-energy high-current electron beams in plasma-anode electron guns, *Plasma Phys. Rep.*, vol. **44**(1), 18, 2018; doi: 10.1134/S1063780X18010130
- [10] D. J. Rej, H. A. Davis, J. C. Olson, G. E. Remnev, A. N. Zakoutaev, V. A. Ryzhkov, V. K. Struts, I. F. Isakov, V. A. Shulov, N. A. Nochevnaya, R. W. Stinnett, E. L. Neau, K. Yatsui, W. Jiang, Materials processing with intense pulsed ion beams, *J. Vac. Sci. Technol. A*, vol. **15**(3), 1089, 1997; doi: 10.1116/1.580435
- [11] I. E. Garkusha, O.V. Byrka, V.V. Chebotarev, N.T. Derepovski, G. Müller, G. Schumacher, N.S. Poltavtsev, V.I. Tereshin, Properties of modified surface layers of industrial steel samples processed by pulsed plasma streams, *Vacuum*, vol. **58**, 195201, 2000; doi: 10.1016/S0042-207X(00)00168-8
- [12] D. Wang, Y. Yang, T.Guo, X. Xiong, Y. Xie, K. Li, B. Li, M. Ghali, Effect of pulse bias voltages on performance of CdTe thin film solar cells prepared by pulsed laser deposition, *Sol. Energy*, vol. **213**, 118, 2021; doi: 10.1016/j.solener.2020.11.041
- [13] A. Nikmah, D. I. Rudyardjo, J. Ady, A. Taufiq, Studies on density, corrosion rate and hardness characteristics of stainless steel implanted by nitrogen ion, *IOP Conf. Ser., Mater. Sci. Eng.*, vol. **515**(1), 012018, 2019; doi: 10.1088/1757-899X/515/1/012018
- [14] A.I. Ryabchikov, High-Intensity Implantation With an Ion Beam's Energy Impact on Materials, *IEEE Trans. Plasma Sci.*, vol. **49**(9), 2529, 2021; doi: 10.1109/TPS.2021.3073942
- [15] A.I. Ryabchikov, D.O. Vakhrushev, S.V. Dektyarev, Features of the formation and diagnostics of powerful metal ion beams with submillisecond duration, *Nucl. Inst. Methods Phys. Res. A*, vol. **1057**, 168711, 2023; doi: 10.1016/j.nima.2023.168711
- [16] A.I. Ivanova, G.A. Bleykher, Numerical Simulation of Thermal Processes and the Effect of Heating of Near-Surface Layers of Titanium on the Diffusion Transfer of Dopants during High-Intensity Pulsed Ion Implantation, *J Surf. Invest.: X-Ray Synchrotron Neutron Tech.*, vol. **17** (6), 1458, 2023; doi: 10.1134/S1027451023060289
- [17] H.D. Vora, S. Santhanakrishnan, S.P. Harimkar, S.K.S. Boetcher and N.B. Dahotre. One-dimensional multipulse laser machining of structural alumina: evolution of surface topography, *Int. J. Adv. Manuf. Tech.*, vol. **68**, 69, 2013; doi: 10.1007/s00170-012-4709-8
- [18] Comsol Multiphysics, Heat Transfer Module User's Guide, Version 6.1. [online]; <https://doc.comsol.com/6.1/doc/com.comsol.help.heat/HeatTransferModuleUsersGuide.pdf>.
- [19] S. Kuge, H. Nakashima, Solubility and Diffusion coefficient of electrically active titanium in silicon, *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. **30**(11A), 2659, 1991; doi: 10.1143/JJAP.30.2659
- [20] A.V. Gurulev, A.I. Ivanova, D.O. Vakhrushev, O.S. Korneva, D.D. Efimov, A.A. Chernyshev, Modification of silicon under synergy of high-intensity implantation of titanium ions and energy influence of a high-power ion beam on a surface, *Materials. Technologies. Design*, vol. **6**(1), 91, 2024; doi: 10.54708/26587572\_2024\_611691