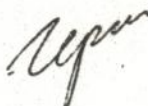


ОДЕСЬКА ДЕРЖАВНА АКАДЕМІЯ
КАРЧОВИХ ТЕХНОЛОГІЙ

На правах рукопису

ГЕРЕГА Олександр Миколайович



ВИКОРИСТАННЯ ПЕРКОЛЯЦІЙНИХ МОДЕЛЕЙ
У ДОСЛІДЖЕННЯХ ВЛАСТИВОСТЕЙ
МОЛЕКУЛЯРНИХ СИСТЕМ

Спеціальність 01.04.14. – теплофізика та
молекулярна фізика

А в т о р е ф е р а т
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата технічних наук

АВ 32.020

Дисертація є рукопис.

Робота виконана в Одеському державному політехнічному
університеті.

Науковий керівник - доктор технічних наук, професор
Становський Олександр Леонідович

Офіційні опоненти - доктор технічних наук, професор,
академік Мазур Віктор Олександрович;

доктор фізико-математичних наук,
професор Дроздов Валентин Олексійович.

Провідна організація - Фізико-хімічний інститут
ім. О.В.Богатського НАН України.

Захист відбудеться 22 березня 1995 року об 11 годині на
засіданні спеціалізованої вченої ради К 068.35.04 при Одеській
державній академії харчових технологій за адресов: 270039,
м.Одеса, вул. Канатна, 112.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Одеської
державної академії харчових технологій.

Автореферат розісланий 21 лютого 1995 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради
К.Т.Н. доцент

В.М. ТИЩЕНКО

ЛННБ України ім.В.Стефаніка



00777026 (Т)

ЛННБ В. Стефаніка
України

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність проблеми. Розвиток сучасних галузей науки та техніки, для яких потрібні нові технології та матеріали стимулює розробку нових методів та процесів за допомогою математичних моделей. Вимоги мікроелектроніки роблять актуальними задачі дослідження властивостей та структури напівпровідників та фоточутливих полікристалічних плівок; вимоги машинобудування - використання нових технологічних процесів та матеріалів і т.ін.

Для створення напівпровідників з певними властивостями може бути використана іонна імплантація. Особливий інтерес має малодосліджена область низьких доз. При дозах 10^{18} - 10^4 см⁻² аморфізований шар, що утворюється, можна розглядати як фрактальний об'єкт. Актуальною є задача дослідження залежності властивостей такого шару від параметрів випромінювання, виду іонів, матеріала мішені та т.ін.

Використання перколяційних методів дозволяє отримати детальну інформацію про фоточутливі полікристалічні плівки напівпровідників. Властивості таких плівок суттєво залежать від просторового розподілу "почутливих" зерен, їх розміру, характеристик носіїв (час життя, довжина дифузії та інші). "Почутливі" зерна, хаотично розподілені на плівці, утворюють фрактальний об'єкт, розмірність та властивості якого обумовлюються технологією виготовлення.

Крім того, так звані ефекти дальності та гетерування у кристалах також отримують свою інтерпретацію у рамках уявлень теорії протікання.

Дослідження, виконані у рамках дисертації, відповідають розділу 05.01.01 - "Розробка структур, алгоритмів и

математических моделей технологических процессов" Координаційного плану НДР Вченої ради по проблемі "Новые процессы получения и обработки металлических материалов" Академії наук.

Мета роботи - підвищення якості напівпровідникових матеріалів шляхом управління формуванням їх структури на основі створення перколяційних моделей гетерогенних твердотільних структур.

Для досягнення цієї мети в роботі вирішені такі задачі:

- досліджені структури аморфізованих областей, що виникають при малих дозах імплантованих іонів;
- досліджена залежність властивостей фоточутливих полікристалічних плівок від їх структури;
- розроблен метод експрес-контролю якості фоточутливих плівок.

Автор захищає.

1. Перколяційну модель кластерів в іонно-імплантованих напівпровідниках.

2. Перколяційну модель ефекту дальності.

3. Методику експрес-контролю якості фоточутливих полікристалічних плівок.

Наукова новизна.

1. Показана можливість використання уявлень о перколяційно-аморфній фазі (ПАФ) для початкової стадії аморфізації матеріалів.

2. Показана можливість інтерпретації на основі перколяційної теорії експериментальних даних про порогову залежність властивостей напівпровідників при випромінюванні.

3. Установлена залежність ефектів дальності при іонній імплантації від перколяційних параметрів кластерів розпоряджених областей.

4. Виявлен оптимальний інтервал доз для максимального ефекту гетерування при імплантації іонів, який виникає внаслідок дифузії дефектів під дією механічних напружень, утворених кластерами дефектів.

5. Досліджені нові перколяційні системи.

Практична цінність роботи. На базі перколяційної моделі отримані рекомендації по оптимізації полікристалічних плівок. Розроблена методика експрес-контролю якості плівок. Результати роботи використані на виборочному об'єднанні "Реом" Мінмашпрому України і рекомендовані до використання на виробничому об'єднанні "Електромаш" (м. Одеса) та на заводі "Промав'язок" Міністерства зв'язку України (м. Одеса).

Апробація роботи. Основні положення дисертації докладались на міжнародній конференції по іонній імплантації (Болгарія, 1990р.), на XIV та XV семінарах "Радиационная физика полупроводников" (Новосибирск), на 23, 27 та 30 засіданнях постійного семінару по моделюванню на ЕОМ радіаційних та інших дефектів у кристалах (Одеса), на нараді-семінарі "Аморфные полупроводники и диэлектрики на основе кремния в электронике" (Одеса), на Всесоюзній конференції "Ионно-лучевая модификация материалов" (Черноголовка, 1987 р.), на семінарі "Використання обчислювальної техніки та математичного моделювання у наукових дослідженнях" (Одеса, 1994 р.).

Публікації. За матеріалами дисертації надруковано 9 робіт.

Структура та об'єм роботи. Дисертація викладена на 102 сторінках друкованого тексту, складається з вступу, 4 глав та додатку, містить 6 таблиць та 118 найменувань використаних джерел.

ЗМІСТ РОБОТИ

У першій главі надан огляд використання перколяційних моделей, розглядені теоретичні та експериментальні роботи, присвячені електропровідності полікристалічних напіпровідників, визначенню умов спостереження нелінійної перколяційної провідності, її залежності від крупномасштабної структури матеріала.

У главі приведен огляд задач, які стосують перколяційні системи з низьким порогом, та належать новому класу перколяційних задач. Описана також можливість утворення модельних систем з наперед заданим перколяційним порогом.

У другій главі списані результати моделювання перколяційних кластерів у розупорядкованих слоях, утворених при іонній імплантації.

Відомо, що процес аморфізації у розвитку іонної імплантації починається з виникнення скрем'я розупорядкованих областей (РО), які з часом утворюють безперервний аморфізований об'єм, нерівномірно розподілений у кристалі. Це дає можливість стверджувати, що на початкових стадіях аморфізації виникає перколяційний кластер, складений з РО.

Приведена модель являє собою хвотично розташовані на площині двумірні утвори, складені з вузлів решітки, які утворюють деяку кількість координативних сфер, при з'єднанні котрих виникає безкінцевий кластер (рис. 1).

Модель є геометричною і не включає до себе властивості мікроструктури окремих розупорядкованих областей.

Моделювання здійснювалось на двумірних решітках. Обґрунтована доцільність такого розгляду. Формування безкінцевого кластеру з вузлів решітки здійснювалось кількома засобами. У кожному з них моделювався процес імплантації іонів різної фіксованої енергії.

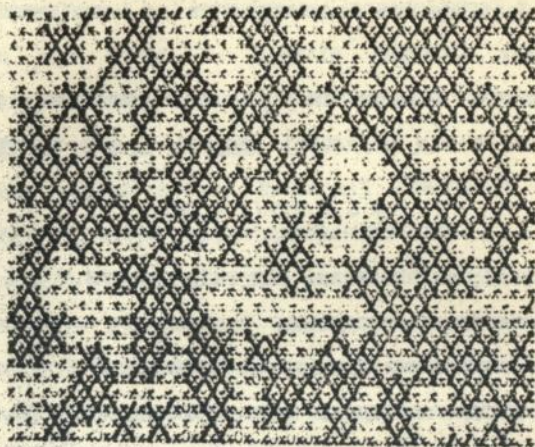


Рис.1. Квасер, отриманий на трикутній решітці.

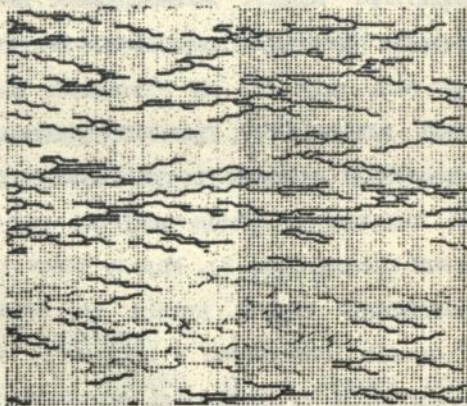


Рис.2. Трековий квасер.

Основа відмінність від відсмих задач складається у засобі формування безкінцевого кластеру та у вирішенні питання о критичних дозах.

З результатів машинних експериментів випливає, що залежність модельної дози Φ від модельної енергії E має вигляд

$$\Phi = A/(B+I) + B/E, \quad (I)$$

де A і B – сталі, які залежать від тилу решітки.

Така залежність знаходиться у згоді з експериментальними результатами, отриманими при іонній імплантації.

Окремо розгляден випадок, коли модельна енергія позитивна, але має місце рст розміру одиничних розупорядкованих областей при повторному потрапленні модельного іона у цю або близьку P_0 .

Має місце ряд фізичних процесів, у яких виникають трекові структури. Властивості таких структур зручно описувати за допомогою перколяційної теорії. Такий підхід дозволяє оцінювати критичну концентрацію треків та передбачувати критичну поведінку системи.

Для дослідження властивостей трекових кластерів запропонована модель, яка являє собою хаотично розташовані на поверхні двумірні гольчаті утвори, складені з вузлів решітки, при з'єднанні котрих виникає безкінцевий кластер (рис.2). Модель також є геометричною.

У роботі розглядена задача вузлів на квадратній решітці, складеній з 10^4 вузлів. Розглядено 9 варіантів, в кожному з яких довжина трека фіксувалась та приймавсь дорівняноі $\rho = 10, 20, \text{ та } 30$ вузам, а максимальний вугол розсіяння мав значення $\phi = \pm 10, \pm 15 \text{ та } \pm 20$ градусів.

У третій главі розглядені ефекти дальнодії при іонній

імплантації. У главі описані особливості ефекта дальності, а також властивості, які не знаходять пояснення у традиційних уявленнях про цей ефект, - дифузія дефектів, довгопробіжена міграція електронів збурень з імплантованої області, розігрів образці під іонним пучком та інші.

Запропонована модель ефекту дальності базується на уявленнях про перколяційну структуру розупорядкованого слов.

В основу моделі покладені такі положення. При зростанні дози імплантованих іонів у кристалі виникають зародки аморфізованої фази, що в значній мірі відрізняються по механічним властивостям від кристалічної матриці. Механічні напруження (МН), що виникають за рахунок відмінності модулів пружності аморфної та кристалічної фаз, поширюються на макроскопічні відстані. При малих дозах, коли кристал ще не аморфізований, МН, що обумовлені окремими довільно розташованими РО, починають впливати на кристал цілком. По досягненню дози аморфізації, коли у кристалі виникає перколяційний кластер аморфізованої фази, МН зростають стрибком.

Такий характер залежності МН від дози може бути пояснений на базі уявлень перколяційної теорії.

Відповідно цій теорії модулі тиску K та зсуву μ залежать від кореляційної довжини L у фрактальній системі як

$$K \sim \mu \sim L^{d-1}, \quad (2)$$

де d - розмірність простору.

З відношення (2) слідує, що у момент появи безкінцевого кластеру значення модулів K та μ зміняться стрибком, оскільки для ізольованих аморфізованих областей (кінцевих кластерів) кореляційна довжина приблизно дорівнює розмірам області, а у разі виникнення безкінцевого кластеру - лінійному розміру кристалу.

Таким чином, модель, що заснована на уявленнях об'єморфізованої області як о перколяційнім кластері, дозволяє пояснити необхідність досягнення порогової дози іонів для виникнення ефекту дальності.

Розглянуті причини, завдяки котрим механічні напруження визначають ефект дальності при іонній імплантації; наведені оцінки ряду фізичних параметрів та відомий експериментальний матеріал, який потрібно описати у рамках запропонованої моделі.

Четверта глава присвячена моделюванню fotocутливих плівок на основі перколяційної теорії.

У пропонуємій моделі сукупність випадково розташованих на площині двумірних утворів відповідає проекціям кристалітів на площину основи плівки.

Відомо, що властивості плівки суттєво змінюються у процесі рекристалізації. Тому викликає інтерес зміна властивостей безкінцевого кластеру при розростанні структурних елементів. У задачі розглянуті шість варіантів зростання структурних елементів перколяційної системи.

Неможливість заповнення зернами деяких частин простору при формуванні fotocутливої плівки обумовлює зниження розмірності простору, зайнятому плівкою. Тому для опису властивостей плівки можливо використання фрактальної розмірності. Для її визначення складена програма для ЕОМ. Програма написана на Фортрані та базується на методиці визначення розмірності нерегулярних геометричних об'єктів. Вона дозволяє здійснити експрес-аналіз мікрофотографій плівок, а також зформованих у пам'яті ЕОМ масивів.

У модельних експериментах отримані значення фрактальних розмірностей, які змінюються у межах від 1,72 до 1,79, залежно від розміру модельного зерна.

Розв'язання цієї задачі дозволило отримати нові відомості про особливості перколяційних кластерів з кінцево-розвітленою структурою. Як і у випадку безкінцево-розвітленої структури, має місце змінення критичних індексів у залежності від кореляційного радіуса перколяційного кластеру.

В И С Н О В К И

1. Для дослідження початкової стадії процесу зморфівзації, з'ясування ефекту дальності та спрямованого впливу на якість полікристалічних напівпровідникових плівок необхідно проаналізувати молекулярні структури у прismsьній асимптотиці.

2. Запроваджено поняття перколяційно-аморфної фази у напівпровідниках для визначення прismsьного стану речовини у процесі переходу при іонній імплантації від кристалічного стану до аморфного. За допомогою модельних експериментів доведено, що величина фрактальної розмірності аморфної фази залежить від виду кристала: вона збільшується з ростом маси та енергії імплантованих іонів.

3. Аналіз механічних напружень, що виникають у твердому тілі, та спричиняють зміну рівноважної концентрації дефектів, показує, що ефект дальності при іонній імплантації визначається перколяційною природою розупорядкованих областей.

4. На основі аналізу ефекту дальності показано, що оптимальним інтервалом доз, який забезпечує максимальний ефект дальності, є $10^{12} - 10^{14} \text{ см}^{-2}$.

5. Показано, що у треквих перколяційних системах спостерігається немоноотна залежність фрактальної розмірності та параметрів безкінцевого кластера від геометричних характеристик системи.

6. Показано, що у перколяційних кластерах з кінцево-розгалуженою структурою існує залежність критичних індексів від кореляційної довжини.

7. У модельних експериментах доведено, що із зростанням могутності безкінцевого кластера "відчутливих" зерен зростає провідність fotocутливих напівпровідникових плівок. На основі аналізу фрактальної розмірності таких плівок розроблена методика експрес-контролю їх якості.

8. Встановлено, що схожість початкової стадії кластероутворення при виготовленні тонких плівок дозволяє рекомендувати використання методики експрес-контролю для плівок іншої фізичної природи.

9. Система управління технологічним процесом нанесення плівочних провідних покриттів на керамічну основу резисторів, яка базується на розробленій методиці експрес-контролю якості полікристалічних плівок, пройшла виробниче випробування на одеському ВО "Реом" з позитивним результатом.

Основні результати дисертації надруковані у наступних роботах:

1. Герсга А.Н., Кив А.Е. Перколяционные методы исследования полупроводников // Аморфные полупроводники на основе кремния в электроники. - М.: АПН, 1989. - С.104-111.

2. Герсга А.Н., Искандеров А.Ш., Ярошенко С.Н. Развитие перколяционных моделей физических систем // Известия АН УзССР. -

Серия физ.-мат.- 1990.- №.- С.51-56.

3. Герега А.Н., Кив А.Е. и др. Перколяционные методы в физике неупорядоченных полупроводников / А.Н.Герега, А.Е.Кив, Ю.А.Малюгин, Б.Н.Романюк, И.В.Рудской // Фотоэлектроника.- Киев-Одесса, 1991.- Вып.4.- С.55-59.

4. Герега А.Н., Гутман Г.Л., Ржепецкий В.П. Диффузия и протекание в слабоаупорядоченных средах // Моделирование на ЭВМ структурно-чувствительных свойств кристаллических материалов.- Л.: ЛЭТИ, 1986.- С.107-108.

5. Вознюк Е.И., Герега А.Н., Романюк Б.Н. Перколяционная модель аморфной фазы в Si // Моделирование на ЭВМ структурных дефектов в кристаллах.- Л.: ЛЭТИ, 1988.- С.173-174.

6.Герега А.Н., Ярошенко С.Н. Перколяционная модель трещин на поверхности твердых тел// Моделирование на ЭВМ дефектов и процессов в металлах.- Л.: ЛЭТИ, 1990.- С.149-150.

7. Буткевич В.Г., Герега А.Н., Малюгин Ю.А. Перколяционная модель PbS фоторезисторов// Моделирование на ЭВМ дефектов и процессов в металлах.- Л.: ЛЭТИ, 1990.- С.153.

8. Вавилов В.С.,Герега А.Н., Кив А.Е. Механизмы дальнего действия в радиационных процессах// Моделирование на ЭВМ дефектов и процессов в металлах.- Л.: ЛЭТИ, 1990.- С.156.

9. Герега А.Н., Становский А.Л. Моделирование эффектов аномальной упругости// Новые методы моделирования в машиностроении.- Одесса: ОАПТИ, 1993.- С.2-5.

Герегв А.Н. Применение перколяционных моделей для исследования свойств молекулярных систем.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 01.04.14 - теплофизика и молекулярная физика. Одесская государственная академия пищевых технологий, Одесса, 1995 г.

В диссертации представлены теоретические исследования гетерогенных систем.

Предложены перколяционные модели фоточувствительных поликристаллических пленок и аморфизированных слоев, возникающих в полупроводниках при ионной имплантации.

Показано, что эффект дальнего действия определяется перколяционной природой разупорядоченных областей. Дано объяснение существованию оптимального интервала доз, обеспечивающего максимальный эффект геттерирования.

На основе анализа фрактальной размерности фоточувствительных полупроводниковых пленок разработана и внедрена в производство методика экспресс-контроля их качества.

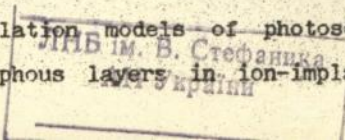
Abstract.

Herega A.N. Application of Percolation Models for Research Molecular System Properties.

Thesis is presented for a candidate of science degree (technics) on the speciality of 01.04.14 - thermophysics and molecular physics. The Odessa State Academy of Provision Technologies, 1995.

Theoretical research of heterogeneous systems is presented in the theses.

There are presented percolation models of photosensitive polycrystalline films and amorphous layers in ion-implantation



semiconductors.

In theses shown the explanation of there is the threshold dependence of long-range action effect and the optimum of radiation doze for maximum of gettering effect is explained.

A method of definition of thin film's quality is industrially introduced and applied.

Ключові слова: перколяція, фрактальна розмірність, модель, дальнодія, іонна імплантація.

AB 32.020

AB 32.020