

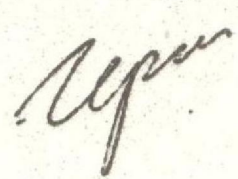
Автор едр.

Г 34

ОДЕСЬКА ДЕРЖАВНА АКАДЕМІЯ
ХАРЧОВИХ ТЕХНОЛОГІЙ

На правец 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

Одеса - 1995

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 адресою: 270039,
м. Одеса, вул. Університетська, 112

Дисертація зберігається у бібліотеці Одеської
державної академії харчових технологій.

ЗАХТ
Бібліотека

В.М.ТИЩЕНКО

ОНАХТ 05.07.11
Використання перколя



v017980

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

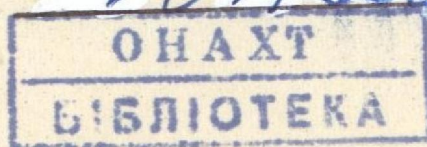
Актуальність проблеми. Розвиток сучасних галузей науки та техніки, для яких потрібні нові технології та матеріали стимулює розробку нових методів та процесів за допомогою математичних моделей. Вимоги мікроелектроніки роблять актуальними задачі дослідження властивостей та структури напівпровідників та 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 $10^{13}-10^{14}$ 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 отримувть свої інтерпретації у рамках уявлень теорії протікання.

Дослідження, виконані у рамках дисертації, відповідають розділу 05.01.01 - "Разработка структур, алгоритмов и



математических моделей технологических процессов" Координационного плану НДР Всесоюзной академии наук по проблеме "Новые процессы получения и обработки металлических материалов" Академии 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 імпантованих 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-імпантованих напівпровідниках.

2. Перколяційну модель ефекту дальності.

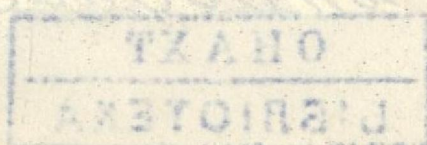
3. Методику експрес-контролю якості фоточутливих полікристалічних плівок.

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 імпантації 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 "Електронмаш" (м. Одеса) та на заводі "Промзв'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 напівпровідників, визначенню умов спостереження нелінійної перколяційної провідності, її залежності від крупномасштабної структури матеріала.

У главі приведен огляд задач, які описують 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 скремлі 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 хаотично розташовані на площині двумірні утвори, складені з вузлів решітки, які утворюють деяку кількість координаційних 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.

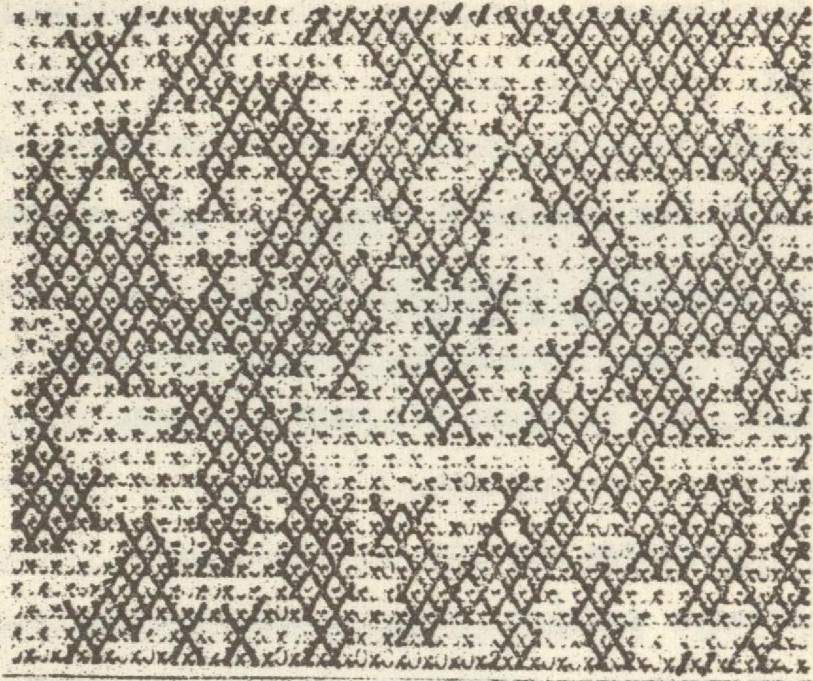


Рис.1. Кластер, отриманий на трикутній решітці.

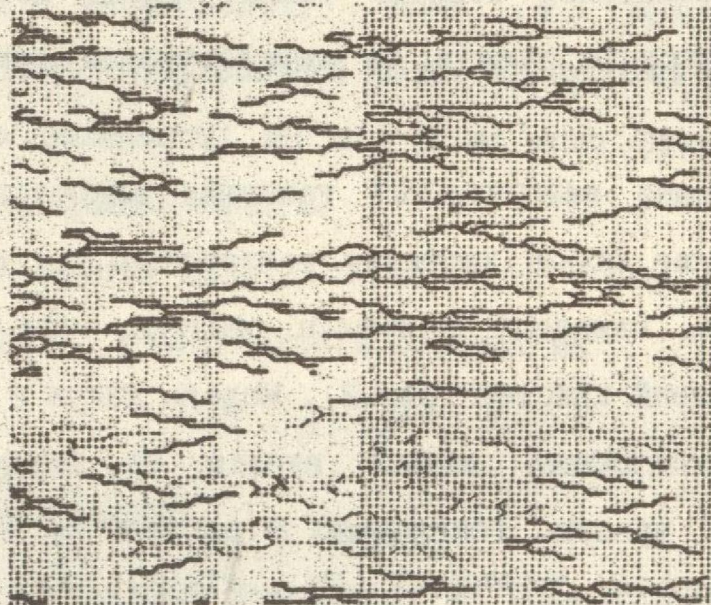


Рис.2. Трековий кластер.

Основа відмінність від відомих 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

$$\Phi = A/(E+1) + B/E, \quad (1)$$

де A і B - сталі, які залежать від типу решітки.

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

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

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 треконих 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, складеної з 10^4 вузлів. Розглядено 9 варіантів, в кожному з яких довжина трека фіксувалась та приймалась дорівняною $\rho = 10, 20, \text{ та } 30$ вузам, а максимальний вугол розсіяння мав значення $\varphi = \pm 10, \pm 15$ та ± 20 градусів.

У третій главі розглядені ефекти дальності 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 електронних збурювань з імпантованої області, розігрів образцу 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 імпантованих іонів у кристалі виникають зародки аморфізованої фази, що в значній мірі відрізняються по механічним властивостям від кристалічної матрици. Механічні напруження (MH), що виникають за рахунок відмінності модулів пружності аморфної та кристалічної фаз, поширюються на макроскопічні відстані. При малих дозах, коли кристал ще не аморфізований, MH , що обумовлені окремими довільно розташованими РО, починають впливати на кристал цілком. По досягненню дози аморфізації, коли у кристалі виникає перколяційний кластер аморфізованої фази, MH зростають стрибком.

Такий характер залежності MH 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 змінюються 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 аморфізованій 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 пропонуемій моделі сукупність випадково розташованих на площині двумірних утворів відповідає проекціям кристалітів на площину основи плівки.

Відімо, 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 радіусу перколяційного кластеру.

В И С Н О В К И

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

2. Запроваджено поняття перколяційно-аморфної фази у напівпровідниках для визначення проміжного 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 трекових перколяційних системах спостерігається немонотонна 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. Герєга А.Н., Кив А.Е. Перколяционные методы исследования полупроводников // Аморфные полупроводники на основе кремния в электрони е.- М.: АПН, 1989.- С.104-111.

2. Герєга А.Э., 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 слабоупорядоченных средах // Моделирование на ЭВМ структурно-чувствительных свойств кристаллических материалов.- Л.: ЛФТИ, 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.: ЛФТИ, 1988.- С.173-174.

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

7. Буткевич В.Г., Герега А.Н., Малюгин Ю.А. Перколяционная модель PbS фотрезисторов // Моделирование на ЭВМ дефектов и процессов в металлах.- Л.: ЛФТИ, 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.: ЛФТИ, 1990.- С.156.

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

Герсга 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.

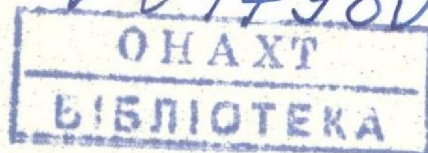
There are presented percolation models of photosensitive polycrystalline films and amorphous layers in ion-implantation

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.



Подп. к печати 15.02.95г. Формат 60x84 1/16.
Объем 0,75п. л. 0,5уч. изд. л. Заказ № 131/3. Тираж 100 экз.
Гортипография Одесского управления по печати, цех №3.
Лерина 49.