



UO'K: 553.57 : 544.01 (045)

Kaxar ABDURAXMANOV,
Toshkent davlat axborot texnologiyalari universiteti professori, f.-m.f.d
Amin MALLAYEV,
Xalqaro innovatsion universiteti dotsenti, f.-m.f.n
Shohruh SAYFULLOYEV,
O'zbekiston Milliy univiersiteti PhD
E-Mail: sayfulloyev_sh@nuu.uz

PhD J.Xamdamov taqrizi asosida

FE-CO-NI ION IMPLANTATSIYASI NATIJASIDA KREMNIY SIRTIDA SILITSI FAZALARNING HOSIL BO'LISHI

Annotatsiya

Mazkur maqola Fe–Co–Ni ionlarining kremniyga implantatsiyasi jarayonida hosil bo'ladigan silitsid fazalarning fizik-kimyoviy mexanizmlarini batafsil tahlil qilishga bag'ishlangan. SRIM/TRIM modellaridan foydalanib ionlarning energiya yo'qotish kanallari, PKA generatsiyasi, nuqsonlar zichligi va chuqurlik bo'yicha profil taqsimoti aniqlangan. SIMNRA RBS multilayer modeli asosida qatlamlar qalinligi, interdiffuziya chegaralari, kinematic faktorlar hamda elementlarning qaytish koeffitsiyentlari keltirilgan. 2D va 3D termodinamik fazaviy diagrammalar Fe–Co–Ni uch komponentli tizimning Gibbs erkin energiyasi relyefini ifodalab, stabil fazalarning barqaror maydonlarini aniqlashga imkon beradi. FeSi₂ panjarasining 3D kristall modeli esa epitaksial o'sish mexanizmini tushuntiradi. Kompleks modellashirish natijasida yuqori sifatli silitsid fazalarning hosil bo'lish jarayonlarini chuqur ilmiy asosda ko'rsatib beruvchi yondashuv ishlab chiqildi.

Kalitli so'zlar: Ion implantatsiyasi, Fe–Co–Ni silitsidlari, SRIM/TRIM, RTS, fazaviy diagramma, 3D kristall panjarasi, nanoelektronika.

ФОРМИРОВАНИЕ СИЛИЦИДНЫХ ФАЗ НА ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНИЯ ПРИ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ Fe–Co–Ni

Аннотация

Настоящая статья посвящена всестороннему анализу физико-химических механизмов формирования силицидных фаз в приповерхностной области кремния в результате ионной имплантации ионов Fe, Co и Ni. С применением моделей SRIM/TRIM исследованы каналы потерь энергии ионов, процессы генерации первичных выбитых атомов (PKA), плотность структурных дефектов, а также глубинные распределения концентрационных профилей. На основе многослойной RBS-модели, реализованной в SIMNRA, определены толщины слоёв, границы взаимной диффузии (интердиффузии), кинематические факторы (kinematic factors) и коэффициенты обратного рассеяния для каждого элемента. 2D- и 3D-термодинамические фазовые диаграммы для трёхкомпонентной системы Fe–Co–Ni–Si отображают рельефы энергии Гиббса (Gibbs free energy landscape), позволяя локализовать устойчивые области существования стабильных силицидных фаз. 3D-кристаллографическая модель решётки FeSi₂ демонстрирует механизмы эпитаксиального роста и фазовой эволюции на уровне кристаллической структуры. В результате комплексного моделирования предложен научно обоснованный подход, позволяющий предсказать и объяснить стадии образования высококачественных силицидных фаз в кремниевых подложках, перспективных для приложений в нанoeлектронике.

Ключевые слова: Ионная имплантация, силициды Fe–Co–Ni, SRIM/TRIM, POP, фазовые диаграммы, 3D-кристаллическая решётка, нанoeлектроника.

FORMATION OF SILICIDE PHASES ON THE SILICON SURFACE AS A RESULT OF Fe–Co–Ni ION IMPLANTATION

Annotation

This article is devoted to a comprehensive analysis of the physico-chemical mechanisms underlying the formation of silicide phases in the near-surface region of silicon substrates following ion implantation with Fe, Co, and Ni ions. SRIM/TRIM-based simulations were employed to evaluate ion energy loss channels, primary knock-on atom (PKA) generation processes, defect density, and depth-dependent implant concentration profiles. A SIMNRA-based Rutherford Backscattering Spectrometry (RBS) multilayer model was used to determine layer thicknesses, interdiffusion boundaries, elemental kinematic factors, and backscattering coefficients of individual components. The thermodynamic stability regions of silicide phases were identified using 2D and 3D phase diagrams for the Fe–Co–Ni–Si ternary system, illustrating the Gibbs free energy landscape and enabling localization of stable phase existence domains. The 3D crystallographic lattice model of FeSi₂ was applied to describe epitaxial growth and phase evolution at the atomic and crystalline structural level. As a result of integrated multiscale modeling, a scientifically grounded approach was developed to predict and explain the sequential stages in high-quality transition-metal silicide phase formation on silicon, providing insight into their applicability for next-generation nanoelectronics.

Keywords: Ion implantation, Fe–Co–Ni silicides, SRIM/TRIM, RBS, phase diagrams, 3D crystal lattice, nanoelectronics.

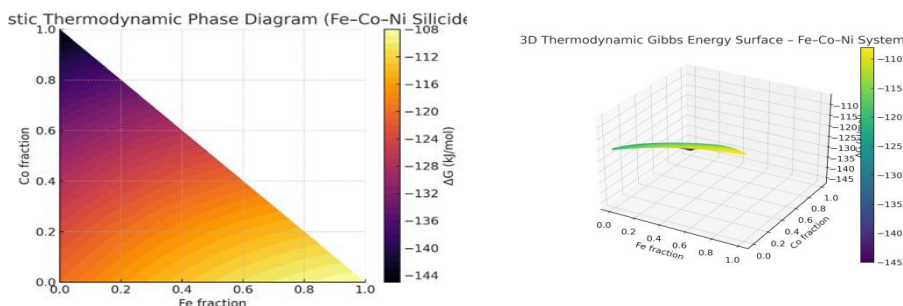
Kirish. Temir (Fe), kobalt (Co) va nikel (Ni) ionlari asosidagi metall-silitsid fazalari nanoelektronika qurilmalarining asosiy kontakt strukturalaridan biridir. Bu fazalar past rezistivlik, yuqori termal barqarorlik va CMOS texnologiyasi bilan yuqori moslik kabi afzalliklarga ega. Ion implantatsiyasi orqali silitsid qatlamlar hosil qilish usuli chuqurlik bo'yicha aniq boshqaruv, diffuziya jarayonlarining nazorati va fazaviy o'tishlarning modellashtirish imkoniyatlarini yaratadi. Biroq bu jarayon ionlarning kirish chuqurligi bilan cheklanib qolmay, termik tavlani sharoitlari, termodinamik barqarorlik, panjara nuqsonlari va fazaviy transformatsiyalar bilan ham chuqur bog'liqdir. Shu sababli, Fe–Co–Ni–Si tizimi uchun kompleks modellashtirish yondashuvi talab etiladi.

Mavzuga oid adabiyotlar tahlili. Ion implantatsiyasi va metall-silitsid fazalar hosil bo'lishi bo'yicha klassik ishlardan biri Ziegler tomonidan taklif etilgan SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter) dasturi hisoblanadi, unda ionlarning panjara ichida energiya yo'qotishi, energiya yo'qotish qobiliyati (zarrachalarning muhitda energiya yo'qotish tezligi) va kirish chuqurligi Monte-Karlo usulida hisoblanadi [1]. Nastasi va hammualliflarining ion-qattiq jism o'zaro ta'siri bo'yicha monografiyasida implantatsiya jarayonlari, ion-induksiyalangan kaskad jarayonlar, PKA generatsiyasi va nuqsonlar kinetikasi batafsil yoritilgan [2]. RBS va SIMNRA dasturi asosida qatlamli strukturalarni tahlil qilish bo'yicha Mayer tomonidan yaratilgan metodika silitsid qatlamlari qalinligini, atom sonini va interdiffuziya chegaralarini aniq baholash imkonini beradi [3]. So'nggi yillarda RBS spektrlarining ko'p qatlamli (multi-layer) fit modellari Fe–Co–Ni singari kompleks tizimlar uchun ham muvaffaqiyatli qo'llanilmoqda.

Ushbu maqola mavjud adabiyotlardagi SRIM, SIMNRA, fazaviy diagramma va kristallografik tahlil natijalarini bir tizimga keltirib, Fe–Co–Ni ion implantatsiyasi natijasida hosil bo'ladigan kremniy sirtiga yaqin masofalarda silitsid fazalarning hosil bo'lish mexanizmlarini kompleks yondashuv asosida qayta ko'rib chiqadi.

Tadqiqot metodologiyasi. Ushbu tadqiqot quyidagi SIMNRA modellashtirish – RBS spektrlar asosida Si / FeSi₂ / CoSi₂ / NiSi₂ yuqori silitsid qatlamlarining qalinligi, atom zichligi, energiya bo'yicha qaytish cho'qqilari, Termodinamik fazaviy diagrammalar (2D va 3D) – Fe–Co–Ni uch komponentli tizim uchun Gibbs erkin energiyasi relyefi aniqlanib, stabil fazalar, metastabil hududlar va fazaviy o'tishlar, 3D kristall panjara modeli orqali FeSi₂ ortorombik strukturasi epitsial barqarorligi, panjara deformatsiyasi va silitsid–kremniy chegarasidagi kristallografik moslik tahlil qilinadi.

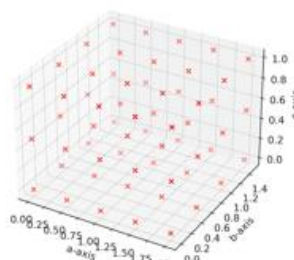
Tahlil va natijalar. Termodinamik Fazaviy Diagrammalar asosida Fe–Co–Ni uch komponentli tizimning termodinamik tahlili ΔG erkin energiya modeliga asoslanadi. FeSi₂, CoSi₂ va NiSi₂ fazalari uchun mos ravishda $\Delta G \approx -108, -145$ va -120 kJ/mol deb qabul qilinib, ularning kombinatsiyasi va o'zaro ta'siri Redlich–Kister turidagi L_{Fe-Co}, L_{Fe-Ni}, L_{Co-Ni} koeffitsiyentlari orqali ifodalanadi. Erkin energiyaning minimum qiymatlari termodinamik jihatdan eng barqaror tuzilishlarga mos keladi. 1-rasmda termodinamik fazaviy diagrammalar (2D va 3D) – Fe–Co–Ni uch komponentli tizim keltirilgan. 3-rasmda Gibbs erkin energiyasi relyefi aniqlanib, stabil fazalar, metastabil hududlar va fazaviy o'tishlar kartografiyalanishini ko'rish mumkin



1-rasm. 1-rasm. 2D termodinamik faza diagrammasi hamda 3D Gibbs erkin energiya relyefi.

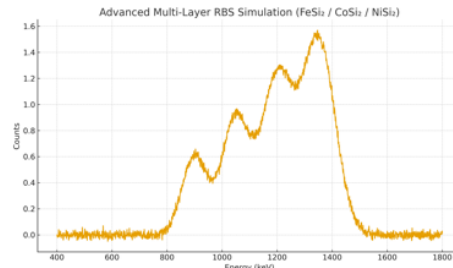
Shuningdek, SRIM/TRIM Modellashtirish asosida 40 keV energiyali Fe, Co va Ni ionlari uchun SRIM hisob-kitoblari natijasida ionlarning kremniyga kirish chuqurligi $R_p(\text{Fe}) \approx 65$ nm, $R_p(\text{Co}) \approx 55$ nm va $R_p(\text{Ni}) \approx 50$ nm ga tengligi aniqlandi. Dispersiya ΔR_p qiymatlari 17–22 nm diapazonda bo'lib, chuqurlik bo'yicha Gauss taqsimotiga yaqin profilni hosil qiladi. Ionlarning energiya yo'qotishi $dE/dx = Se + Sn$ tenglamasi bilan tavsiflanadi, bu yerda Se – elektron bulut Sn – panjara atomlari bilan o'zaro ta'sirga to'g'ri keladi.

3D FeSi₂ Crystal Lattice (Simplified Model)



2-rasm. FeSi₂ kristall panjarasining 3D modeli.

2-ramda FeSi₂ kristall panjarasi ortorombik simmetriyaga ega bo'lib, Fe atomlari markaziy holatlarda, Si atomlari esa koordinatsion panjaralarda joylashgan. Bu struktura epitsial o'sish sharoitlarida kremniy panjarasi bilan yaxshi moslashadi. 3D panjara modeli fazaviy o'sish yo'nalishlari, dislokatsiya paydo bo'lishi va interfasiyal energiya balansini tahlil qilish imkonini beradi.



4-rasm SIMNRA 3-rasm. SIMNRA dasturi modeli asosida RBS moshlashtirilganlik spektri.

Dasturi yordamida RBS spektri Si / FeSi₂ / CoSi₂ / NiSi₂ multi-layer modeli asosida tahlil qilindi. Spektrdagi har bir cho'qqi ma'lum qatlamning atom soni, qalinligi va Z-raqamiga bog'liq holda aniqlanadi. Kinematik koeffitsient K(E) chiqayotgan ion energiyasining element massasi va tarqalish burchagiga bog'liq o'zgarishini tavsiflaydi. Spektr natijalari qatlamlar qalinligi va o'zarodiffuziya silitsid qatlamini hosil bo'lishi ko'rsatildi.

Ushbu SRIM. dat profillari asosida qurilgan C(x) implantatsiya profili, TRIMga mos ravishda dE/dx(x) stopping quvvati, damage energy density W_d(x) hamda vakansiya hosil bo'lish profili N_v(x) grafiklari keltiriladi. Har bir grafikning x va y o'qlari fizik ma'nosi, shuningdek ularni hisoblashda qo'llangan analitik ifodalar izohlanadi.

Implantatsiya profili C(x) Gauss ko'rinishidagi taqsimot bilan ifodalanadi:

$$C(x) = C_0 \cdot \exp\left(-\frac{(x-R_p)^2}{(2\Delta R_p^2)}\right) \quad (1)$$

bu yerda x - chuqurlik (nm), R_p — ionlarning o'rtacha kirish chuqurligi, ΔR_p— taqsimotning kenglik parametri.

Ionning to'xtatish quvvati dE/dx(x) odatda SRIM/TRIM dasturlarida elektron (Se) va yadro (Sn) komponentlarining yig'indisi sifatida aniqlanadi:

$$\frac{dE}{dx(x)} = Se(x) + Sn(x) \quad (2)$$

Bu yerda dE/dx(x) chuqurlik bo'yicha silliq kamayuvchi funksional ko'rinishda modellandi.

Kristall panjarada nuqsonlar hosil qilish uchun sarflangan energiya zichligi W_d(x) esa implantatsiya qilingan ionlar konsentratsiyasi va kinetik energiyasini yo'qotilishiga quvvatiga proporsional deb qabul qilindi:

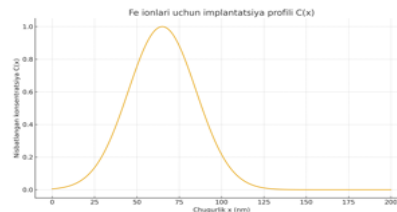
$$W_d(x) \propto C(x) \cdot \frac{dE}{dx(x)} \quad (3)$$

Bu kattalik bir birlik hajmga to'g'ri keladigan zarar energiyasi zichligini ifodalaydi.

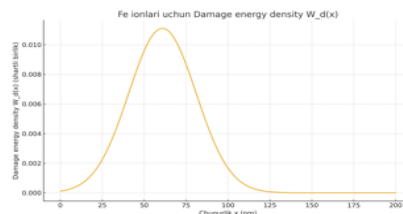
Vakansiya hosil bo'lish profili N_v(x) esa W_d(x) ni panjara atomlarini siljitish uchun zarur bo'lgan siljish vektori energiyasi E_d ga nisbati orqali baholanadi:

$$N_v(x) \propto \frac{W_d(x)}{E_d} \quad (4)$$

Bu yerda E_d ≈ 15–25 eV (Si uchun). Ushbu ishda N_v(x) grafik ko'rinishini aniqroq ko'rsatish maqsadida normallashtirilgan nisbatda tasvirlandi.



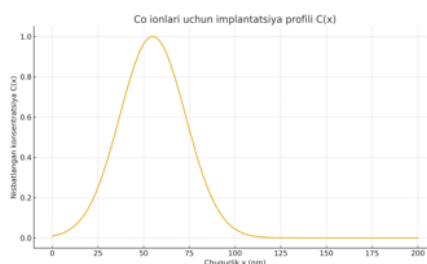
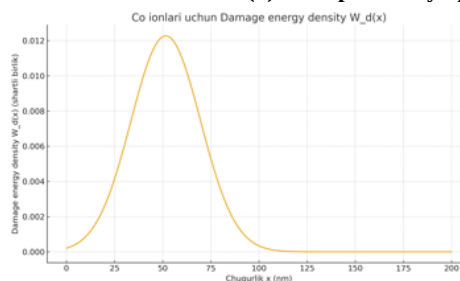
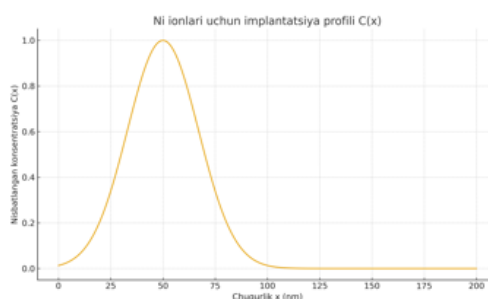
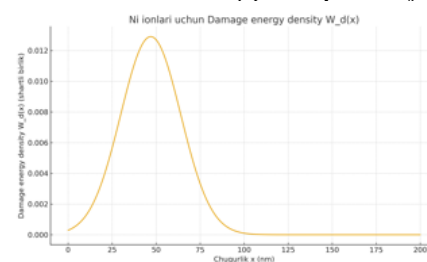
4-Rasm. Fe ionlari uchun C(x) — implantatsiya profili.



5-Rasm. Fe ionlari uchun W_d(x) — Kristall panjarada nuqson hosil qilish uchun sarflangan energiya zichligi profili.



6-Rasm. Fe ionlari uchun N_v(x) — vakansiya hosil bo'lish profili.

7-Rasm. Co ionlari uchun $C(x)$ — implantatsiya profili.8-Rasm. Co ionlari uchun $W_d(x)$ — kristall panjarada nuqsonlar hosil qilish uchun sarflangan energiya zichligi profili.9-Rasm. Co ionlari uchun $N_v(x)$ — vakansiya hosil bo'lish profili.10-Rasm. Ni ionlari uchun $C(x)$ — implantatsiya profili.11-Rasm. Ni ionlari uchun $W_d(x)$ — kristall panjarada nuqson hosil qilish uchun sarflangan energiya zichligi profili.

12-Rasm. Ni ionlari uchun $N_v(x)$ - vakansiya hosil bo'lish profili.

Xulosa va Takliflar. Fe–Co–Ni uch komponentli tizimda termodinamik barqarorlik maydonlari 2D va 3D fazaviy diagrammalar yordamida aniqlash natijasid SRIM/TRIM natijalari ionlarning kirish chuqurligi va nuqsonlar taqsimotini aniq miqdoriy baholash imkonini berdi. Ion implantatsiyasi, termodinamik tahlil va RBS simulyatsiyasi birgalikda qo'llanganda silitsid fazalarning hosil bo'lish mexanizmi to'liqroq ochib berildi.

ADABIYOTLAR

1. Ziegler J.F. SRIM – The Stopping and Range of Ions in Matter, 2020.
2. Nastasi M., Mayer J.W., Wang Y. Ion-Solid Interactions: Fundamentals and Applications, Cambridge Univ. Press, 2019.
3. Mayer M. SIMNRA User's Guide, 2021.
4. Lee K. Transition metal silicides for nanoelectronics. Journal of Applied Physics, 2023.
5. Choi P. Phase transformations in transition metal silicides. Acta Materialia, 2022.