Численное моделирование формирования наноструктур при ионной имплантации

Г.И. Змиевская, А.Л. Бондарева

ФГБУН Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва, Россия, [zmig@mail.ru](mailto:zmig@mail.ru)

Разработан численный метод на основе решения системы СДУ Ито-Стратоновича, асимптотически эквивалентных кинетическим уравнениям в частных производных: Колмогорова-Феллера для кластеризации зародышей дефектов в кристаллической решетке металлов и диэлектриков, а также уравнения Эйнштейна-Смолуховского для моделирования броуновского движения центров масс кластеров. Модели функционал-коэффициентов уравнений учитывают факторы гетерогенного фазового перехода 1-го рода, возникающие при имплантации радиационных потоков инертного газа в тонкий слой карбида кремния и влияние зародышей дефектов на акустические фононы решетки и на дальнодействующие потенциалы косвенных упругих взаимодействий дефектов друг с другом.

В настоящее время технология производства пористого карбида кремния аналогична технологии получения пористого кремния, чаще всего применяют метод анодирования пластин в электролитах, содержащих плавиковую кислоту. Порообразование в карбиде кремния при ионной имплантации бислоя карбид кремния/металл ионами инертных плохорастворимых газов может быть рассмотрено как вероятная технология получения пористого карбида кремния.

Исследована повреждаемость карбида кремния, SiC, используемого в технике, как упрочняющее покрытие и в то же время являющегося перспективным полупроводником 3C-SiC, материалом для солнечных батарей и др. Расчеты пористости в тонком слое материала (~мкм), граничащего с молибденом (подложки, нанонити и др.), проведены с учетом несоответствия параметров решеток полупроводника и металла в радиационных потоках газа *Хе++* от 1014 до 1019 см-2  характерных для параметров плазменных двигателей, на временах порядка 1 мс. В течении флуктуационной стадии кластерообразования под действием ионной имплантации изменяется пористость карбида кремния, а следовательно и прочностные свойства материала, а также ширина запрещенной зоны, диэлектрическая проницаемость материала, спектр поглощения и т.д. Исследование может быть востребовано для оценки возникновения дефектов в форме вакансионно-газовых пор в области контакта карбида кремния и металлического проводника и в качестве накопления новых данных о свойствах различных политипов карбида кремния.

Работа частично поддержана грантами РФФИ 12-01-00490-а, 12-01-00708-а и программой ОМН 3.5 РАН

Литература

1. Zmievskaya G.I., Bondareva A.L., Savchenko Vl.V.**.** ABSTRACT BOOK DSL2013 (International Conference on Diffusion in Solids and Liquids) – DSL 2013- Madrid, Spain (24-28 JUNE, 2013), p. 217 [www.dsl-conference.com](http://www.dsl-conference.com/)
2. Zmievskaya G.I., Bondareva A.L., Savchenko Vl.V., Levchenko T.V.// in book Numerical Analysis of Heat and Mass Transfer in Porous Media. 2012. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. pp. 253-274 Book ISBN: 978-3-642-30531-3