

ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE

FAKULTA STROJNÍ

Ústav fyziky



Bakalářská práce

Simulace hloubkové distribuce implantované příměsi

I. OSOBNÍ A STUDIJNÍ ÚDAJE

Příjmení: **Vacek** Jméno: **Martin** Osobní číslo: **473692**
Fakulta/ústav: **Fakulta strojní**
Zadávající katedra/ústav: **Ústav fyziky**
Studijní program: **Teoretický základ strojního inženýrství**
Studijní obor: **bez oboru**

II. ÚDAJE K BAKALÁŘSKÉ PRÁCI

Název bakalářské práce:

Simulace hloubkové distribuce implantované příměsi

Název bakalářské práce anglicky:

Simulation of depth distribution of implanted elements

Pokyny pro vypracování:

1. Současný stav a úvod do problematiky iontové implantace včetně významu hloubkové distribuce implantovaných prvků.
2. Simulační programy pro predikci hloubkové distribuce, jejich charakterizace, možnosti a potenciál využití.
3. Provedení simulačních výpočtů pro kombinaci Ti – N s různou hustotou terče.

Seznam doporučené literatury:

- [1] RAUTRAY, T. R., NARAYANAN, R. a KIM, K.: Ion implantation of titanium based biomaterials, In: Progress in Materials Science 56, Elsevier Ltd., 2011, s. 1137-1177.
- [2] ZIEGLER, J.F., ZIEGLER, M.D., BIRSACK, J.P.: SRIM – The stopping and range of ions in matter (2010), In: Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B 268, Elsevier Ltd., 2010, s. 1818-1823.
- [3] MIYAGAWA, Y., IKEYAMA, M., NAKAO, S. a MIYAGAWA, S.: Dynamic MC simulation of nitrogen implanted Si/C and Zr/C bilayers, In: Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 153, Elsevier Science B.V., 1999, s. 422-428.
- [4] BURENKOV, A. F., KOMAROV, F. F., KUMAKHOV, M. A. a TEMKIN, M. M.: Tables of ion implantation spatial distributions, V. I. Lenin Belorussian State University, Minsk, USSR, Revised and Enlarged English Edition, 1986, 462 s.

Jméno a pracoviště vedoucí(ho) bakalářské práce:

Ing. Petr Vlčák, Ph.D., ústav fyziky FS

Jméno a pracoviště druhé(ho) vedoucí(ho) nebo konzultanta(ky) bakalářské práce:

Datum zadání bakalářské práce: **22.04.2021**

Termín odevzdání bakalářské práce: _____

Platnost zadání bakalářské práce: _____

Ing. Petr Vlčák, Ph.D.
podpis vedoucí(ho) práce

Ing. Petr Vlčák, Ph.D.
podpis vedoucí(ho) ústavu/katedry

prof. Ing. Michael Valášek, DrSc.
podpis děkana(ky)

III. PŘEVZETÍ ZADÁNÍ

Student bere na vědomí, že je povinen vypracovat bakalářskou práci samostatně, bez cizí pomoci, s výjimkou poskytnutých konzultací. Seznam použité literatury, jiných pramenů a jmen konzultantů je třeba uvést v bakalářské práci.

_____ Datum převzetí zadání

_____ Podpis studenta

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem svou bakalářskou práci vypracoval samostatně a že jsem uvedl v příloženém seznamu veškeré použité informační zdroje v souladu s Metodickým pokynem o dodržování etických principů při přípravě vysokoškolských závěrečných prací, vydaným ČVUT v Praze 1. 7. 2009.

Nemám závažný důvod proti užití tohoto školního díla ve smyslu § 60 zákona č. 121/2000 Sb., o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon).

V Praze dne 18.7.2021

.....

podpis

Poděkování

Především bych chtěl poděkovat vedoucímu práce panu Ing. Petrovi Vlčákovi Ph.D. za trpělivost a odborné rady během vedení mé bakalářské práce. Rád bych také poděkoval panu Ing. Janu Drahokoupilovi Ph.D. za ochotu a vstřícný přístup.

Anotace

Autor:	Martin Vacek
Název:	Simulace hloubkové distribuce implantované příměsi
Rozsah práce:	57 str., 25 obr., 14 tab.
Školní rok vyhotovení:	2021
Škola:	ČVUT v Praze – Fakulta strojní
Ústav:	Ú12102-Ústav fyziky
Vedoucí práce:	Ing. Petr Vlčák, Ph.D.
Využití:	Simulace hloubkové distribuce implantovaných příměsí jsou užitečné pro navrhování a konstruování koncentračních profilů a pro počáteční nastavení podmínek iontové implantace.
Klíčová slova:	iontová implantace, koncentrační profil, systém titan-dusík, program SRIM
Anotace:	<p>Tato bakalářská práce pojednává o možnosti simulace hloubkové distribuce pomocí programu SRIM. Konkrétně se zabývá vlivem změny hustoty materiálu terče při implantaci</p> <p>a navrhuje zjednodušující přístup užitím simulace. Teoretická část práce je věnována přehledu o iontové implantaci, systému Ti-N a možných simulačních nástrojích pro predikci hloubkové distribuce. Praktická část práce je zaměřena na teoretické stanovení hustoty terče během procesu iontové implantace a následné využití simulace programu SRIM k predikci koncentračního profilu dusíku. Výsledkem práce jsou vytvořené teoretické koncentrační profily dusíku, které do značné míry korespondují s experimentálně získanými daty.</p>

Annotation

Author:	Martin Vacek
Title:	Simulation of depth distribution of implanted elements
Extent:	57 p., 25 fig., 14 tab.
Academic year:	2021
University:	CTU in Prague – Faculty of Mechanical Engineering
Department:	Ú12102 – Department of Physics
Supervisor:	Ing. Petr Vlčák Ph.D.
Application:	Simulations of the depth distribution of implanted impurities are useful for design and construction of concentration profiles and for the initial setting of ion implantation conditions.
Key words:	ion implantation, concentration profile, Titanium-Nitrogen system, SRIM program
Annotation:	<p>This bachelor thesis discusses the possibility of simulating the depth distribution using SRIM. Specifically, it deals with the effect of the change in density of the target material during implantation and proposes a simplifying approach using simulation. The theoretical part of the thesis is devoted to an overview of ion implantation, the Ti-N system and possible simulation tools for depth distribution prediction.</p> <p>The practical part of the thesis focuses on on the theoretical determination of the target density during the ion implantation process and the subsequent use of the SRIM simulation program to predict the nitrogen concentration profile. The theoretical nitrogen concentration profiles</p>

developed as a result of the work are largely consistent with the experimentally obtained data.

Seznam použitých zkratk

KP	Koncentrační profil
MC	Monte Carlo
MD	Molekulární dynamika

Seznam použitých veličin, značek a symbolů

m	kg	hmotnost
v	m/s	rychlost
M_1	kg	Hmotnost urychleného atomu
M_2	kg	Hmotnost terčového atomu
T	keV	Kinetická energie iontu
T_{max}	keV	Maximální kinetická energie iontu
T_n	keV	Minimální kinetická energie iontu
E	keV	Energie iontu
p	m	Srážkový parametr
Z_1	-	Atomové číslo implantovaného iontu
Z_2	-	Atomové číslo atomů substrátu
φ	°	Úhel vychýlení
σ	cm^2	Účinný srážkový průřez
$\left(\frac{dE}{dx}\right)_c$	eV/m	Celková brzdná schopnost substrátu

$\left(\frac{dE}{dx}\right)_j$	eV/m	Jaderná brzdná schopnost substrátu
$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e$	eV/m	Elektronová brzdná schopnost substrátu
N_0	cm^{-3}	Počet atomů v $1cm^3$ (počáteční koncentrace)
$S_j(E)$	eVm^2	brzdny účinný průřez pro jadernou brzdnu schopnost
$S_e(E)$	eVm^2	brzdny účinný průřez pro elektronovou brzdnu schopnost
α_B	m	Bohrův stínící poloměr
e	C	Elementární náboj
R	m	Celková trajektorie
R_p	m	Promítnutý dosah
R_v	m	Vektorový dosah
ΔR_p	m	Směrodatná odchylka
$N(x)$	cm^{-3}	Atomová koncentrace příměsi v hloubce x
Φ	cm^{-2}	Fluence
$V(r)$	eV	Interakční potenciál
a	m	Stínící poloměr
r	m	Poloměr
$\Phi(r, a)$	-	Stínící funkce
C_N	%	Koncentrace dusíku
a	Å	Parametr elementární buňky
c	Å	Parametr elementární buňky

m_{Ti}	g/mol	Relativní atomová hmotnost titanu
m_{N}	g/mol	Relativní atomová hmotnost dusíku
N_{A}	mol^{-1}	Avogadrova konstanta
V	Å^3	Objem elementární buňky
ρ	g/cm^3	Hustota

Obsah

1. ÚVOD	13
3. CÍL PRÁCE	14
4. IONTOVÁ IMPLANTACE	15
4.1 ZAŘÍZENÍ PRO IONTOVOU IMPLANTACI.....	16
4.2 APLIKACE METODY.....	17
4.3 BRŽDĚNÍ ENERGETICKÉHO ATOMU V PEVNÉ LÁTCE.....	18
4.4 KONCENTRAČNÍ PROFIL.....	21
4.5 EFEKT IONTOVÉHO KANÁLKOVÁNÍ.....	23
5. TITAN A TI-N SYSTÉM	25
5.1 TITAN.....	25
5.1.1 <i>Struktura titanu</i>	25
5.2 SYSTÉM TI-N.....	26
5.3 IMPLANTACE DUSÍKU DO SLITIN TITANU.....	27
5.3.1 <i>Struktura titanu po dopování dusíkem</i>	27
6. SIMULAČNÍ PROGRAMY	28
6.1 APROXIMACE BINÁRNÍ KOLIZÍ.....	29
6.1.1 <i>Metoda Monte Carlo</i>	30
6.2 SIMULOVÁNÍ KONCENTRAČNÍCH PROFILŮ.....	31
6.3 PROGRAM SRIM.....	31
7. PRAKTICKÁ ČÁST	34
7.1 PŘEDPOKLADY VÝPOČTU TEORETICKÉ HUSTOTY TERČE.....	34
7.2 ZMĚNA HUSTOTY TERČE.....	35
7.2.1 <i>Změna hustoty terče vlivem torby tuhého roztoku (oblast 1 a 2)</i>	35
7.2.2 <i>Změna hustoty terče vlivem tvorby fáze δ (oblast 3)</i>	40
7.2.3 <i>Výsledné hodnoty hustoty</i>	42
7.3 NASTAVENÍ PARAMETRŮ SIMULACE.....	43
7.4 TVORBA KONCENTRAČNÍCH PROFILŮ.....	43
8. VÝSLEDKY	47
8.1 DISKUSE.....	51
9. ZÁVĚR	52

1. Úvod

Materiály strojních součástí jsou pro své účely voleny na základě svých mechanických, fyzikálních a chemických vlastností. Tyto vlastnosti lze pomocí celé řady technologií dále zlepšovat a modifikovat pro konkrétní účel jejich použití či zvýšení jejich životnosti. Tyto modifikace se nejčastěji uplatňují v oblastech podrobených největšímu zatížení, kterými jsou v mnoha případech styčné plochy na povrchu součástí.

Metodou se zajímavým aplikačním potenciálem v oblasti povrchových úprav je iontová implantace. Jedná se o technologii využívající urychlených iontů příměsí k jejich nastřelování do upravované oblasti povrchu součásti, kde ionty příměsí reagují s terčovými atomy za vzniku nového modifikovaného povrchu na atomární úrovni. Tato metoda nachází nejširší uplatnění v oblastech elektrotechniky, kde slouží k implantaci příměsí do polovodičů ke zlepšení jejich vodivosti. Její postupy lze však s výhodou aplikovat i v odvětvích strojního inženýrství, kde našla své využití v implantaci legujících prvků do typicky kovových materiálů, za účelem snížení opotřebení, koroze či únavy.

Metoda ovlivňuje pouze povrch součásti do hloubky typicky desítek až stovek nanometrů za zachování jejich objemových vlastností. Hloubka vniknutí atomů příměsí do pevné látky závisí zejména na jejich energii na hustotě terčové látky a na typu atomů užitých příměsí.

Výsledné zastoupení příměsí v terčovém materiálu lze prezentovat takzvaným hloubkovým koncentračním profilem implantované příměsí v pevné látce. Jedná se o hloubku implantace atomů příměsí vztaženou k procentuálnímu zastoupení vzhledem k celkovému počtu atomů. Teoretický výpočet tvaru koncentračního profilu je velmi složitý, často jej lze však dostatečně uspokojivě popsat Gaussovým (normálním) rozložením s maximem v určité hloubce.

K predikování koncentračních profilů je také možné využít řadu simulačních programů, které jsou schopny numericky modelovat chování urychleného atomu v pevné látce. K tomuto účelu využívají programy různé typy algoritmů na různé úrovni popisu meziatomárních interakcí. Při jejich správném použití nám mohou poskytnout užitečné informace, které lze využít při navrhování reálných experimentů, technologických postupů či k dalším simulacím.

3. Cíl práce

Cílem bakalářské práce je stanovit hloubkovou distribuci implantovaných dusíkových iontů s využitím simulačního programu SRIM. S ohledem na nepolovodičové aplikace implantace dusíku do titanu se aplikují vysoké fluence iontů. V této souvislosti je práce zaměřena na navržení postupu uplatňujícího změnu hustoty terče při implantaci s vysokými fluencemi.

4. Iontová implantace

Iontová implantace je proces, při kterém interaguje energetický svazek atomů (iontů) s pevnou látkou. Důsledkem tohoto procesu pronikají urychlené ionty do pevné látky, kde vlivem srážek s jejími atomy zpomalují a zůstávají v její mřížce. Nejedná se proto o pouhé nanesení vrstvy, ale implantované ionty jsou zaváděny až několik stovek nanometrů pod povrch upravovaného vzorku, kde mohou tvořit nové struktury nebo nahrazovat původní atomy matrice.

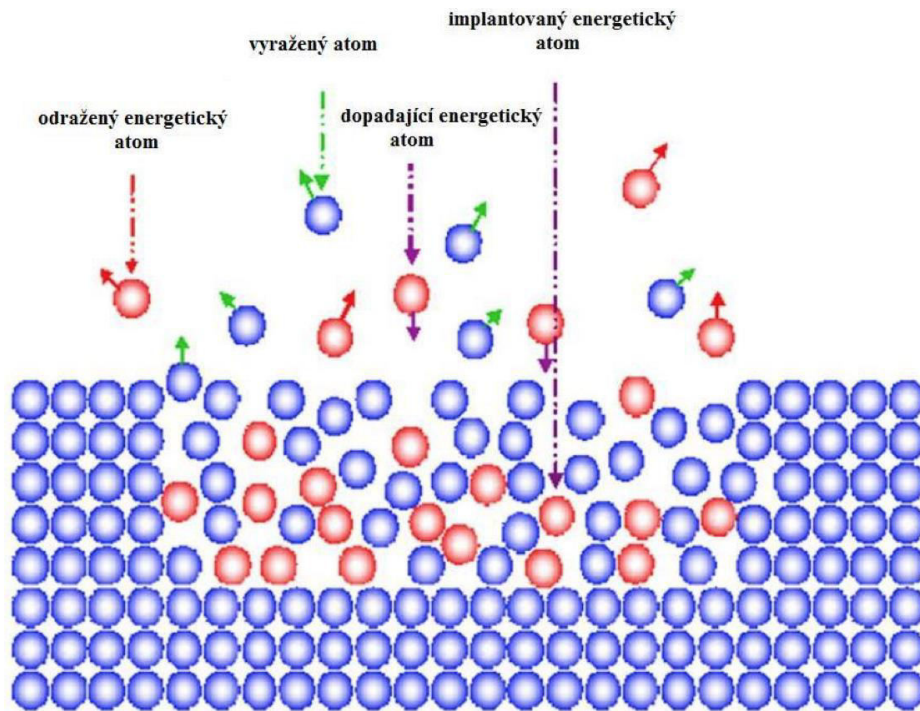
Hloubka vniknutí iontu závisí především na jeho energii a na druhu atomu užitě příměsi. Typicky se pak pohybuje v rozmezí desítek až stovek nanometrů. Dalšími parametry metody jsou pak fluence (počet implantovaných iontů na jednotku plochy za celou dobu implantace), hustota iontového proudu a v některých případech i úhel naklonění energetického svazku vůči rovině povrchu (pro monokrystalické struktury). (4.5)

Při dopadu energetických atomů se část z nich odráží a část proniká pod povrchovou vrstvu substrátu a ztrácí svou energii. Současně dochází i k odprašování svrchní vrstvy substrátu (*Obrázek 1*).

Ztráta energie iontů je způsobena především dvěma srážkovými procesy, jaderným a elektronovým bržděním (pružné a nepružné srážky). Při elektronovém brždění se předává energie mezi elektrony urychlených a terčových atomů. Při tomto typu srážky se část kinetické energie spotřebuje na excitaci elektronů atomů substrátu. Při těchto srážkách se předává pouze malá část energie a trajektorie letícího iontu je ovlivněna jen nepatrně. Tento proces převažuje u vysokoenergetických iontů. Mohou nastat také situace, kdy elektron získá takovou energii, že přejde do vodivostního pásma a tím atom ionizuje. U kovových materiálů je však tento efekt nevýznamný, jelikož volné stavy jsou ihned nahrazeny vodivostními elektrony. U amorfních látek může však tento proces způsobovat transformaci jejich struktury.

Jaderné brždění je vyvoláno vzájemným působením mezi jádry urychlených a terčových atomů. Dochází k němu převážně u nízkoenergetických atomů, které už ztratily významnou část své energie nepružnými srážkami. Při jejich interakci ve větších vzdálenostech dochází k odchýlení letícího atomu o tzv. úhel rozptylu a rozkmitání atomu terčového (dojde k odevzdání části kinetické energie letícího iontu). Při průletu v těsné blízkosti nebo při čelním nárazu urychlený atom změní významně svůj směr nebo je odražen zpět (čelní srážka). Úhel rozptylu a velikost předané energie závisí zejména na blízkosti průletu energetického atomu od atomu pevné látky. Poté, co ionty ztratí veškerou svou kinetickou energii se ustálí v nejčastěji intersticiální poloze vůči mřížce substrátu. Výsledné rozložení příměsi v terčovém materiálu lze prezentovat koncentračním profilem. (4.4)

Terčový atom může být ze své původní (rovnovážné) polohy vyražen za vzniku krystalových poruch. K jejich odstranění se v některých případech po ukončení implantace nechá materiál tepelně žíhat typicky za nízkých teplot (<600 °C). V případě vzniku amorfní fáze je nutné materiál žíhat i za vyšších teplot k epitaxiálnímu průběhu napravení mřížky. [1] [2] [3] [4] [5]



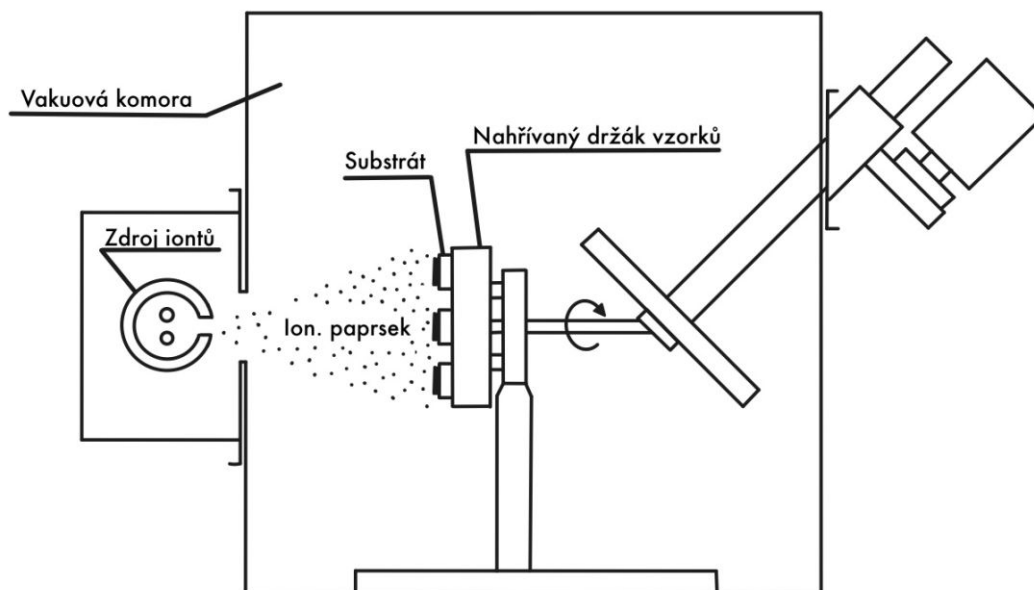
Obrázek 1 Interakce urychlených iontů s pevnou látkou. [1]

4.1 Zařízení pro iontovou implantaci

Přístroje určené k iontovému implantování (Obrázek 2) se mohou svým provedením či konstrukcí lišit. Každý přístroj však musí obsahovat několik základních prvků, bez kterých nelze kýženého efektu dosáhnout.

V první řadě se jedná o iontový zdroj, ve kterém jsou vytvářeny ionty atomů příslušného prvku. Ty sem mohou být přiváděny v plynném stavu či umístěny do prostoru zdroje. Zde ionty získají potřebnou energii (v řádech desítek až stovek keV) a pomocí extrakční, urychlovací a fokusační elektrody jsou uspořádány do energetického svazku, který musí být po celou dobu ve vakuu. V tomto svazku jsou mimo ionty požadované příměsi i nechtěné nečistoty v podobě atomů jiných prvků. K separaci požadovaných iontů putuje svazek přes hmotonový separátor, kde je pomocí magnetického pole elektromagnetu rozdělován na dráhy s různým poloměrem v závislosti na parametrech daných atomů. Separátor může být umístován před či za urychlovačem v závislosti na typu přístroje a jeho konkrétní specializaci. V další části zařízení je svazek rozmítán, aby došlo k rovnoměrnému zasažení vzorku po celé ploše dle požadované hodnoty fluence. Vzorky podrobené implantování jsou uchyceny ve vakuové komoře, kde jsou přehřívány na požadovanou teplotu. Některé implantátory dosahují rovnoměrného zasažení modifikované oblasti pohybu implantovaného vzorku ve vakuové komoře za zachování stacionárního svazku iontů. Jedná se zpravidla o vysokoenergetické implantátory. Celková doba procesu může být v řádu minut nebo i desítek hodin.

Pro aplikaci ve strojírenství, kde se nejčastěji setkáme s implantací dusíkových iontů do kovových materiálů, lze například pominout separátor. Takovým implantátorem je například TECVAC 221 od firmy TECVAC LTD. [6] [7]



Obrázek 2 Zjednodušené schéma iontového implantátoru. Převzato s úpravou z [8]

4.2 Aplikace metody

Implantace iontů našla své uplatnění zejména v elektrotechnice. Nejčastěji se tato technologie používá k implantaci příměsí (donorů a akceptorů) do polovodičů, kde modifikace povrchu dokáže zvýšit jeho vodivost. Metoda je však využívána i ve strojírenství, zejména v problematice tribologie, kde se využívá ke změně chemického složení povrchu materiálu za účelem zlepšení jeho vlastností. Dalším příkladem může být implantace dusíku do ocelí a slinutých karbidů pro zvýšení životnosti strojírenských součástí a nástrojů. Průmyslové uplatnění nachází metoda také v oblastech koroze, únavy, supravodivosti či v biomedicinském inženýrství. Pro poslední zmíněnou oblast je zajímavá i konkrétní aplikace implantace dusíku do slitin titanu. [7] [1] [9]

Obecně lze konstatovat, že metoda je využívána právě tam, kde lze oproti standardním technologiím a postupům uplatnit její výhody, mezi které patří:

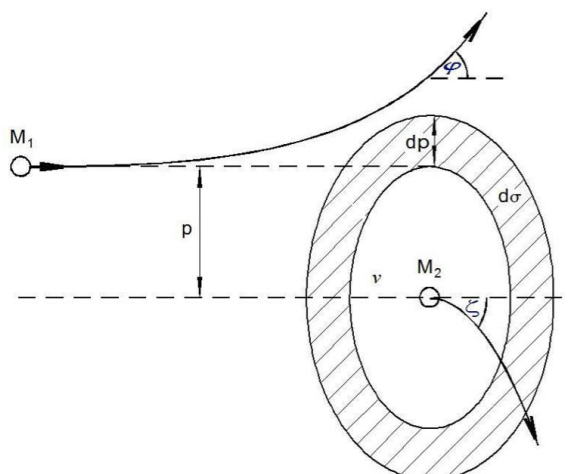
- Schopnost zavést libovolný prvek do libovolné pevné látky (bez ohledu na jeho schopnost difuze či rozpustnosti).
- Výsledná koncentrace příměsí může převyšovat mez rozpustnosti v dané pevné látce.
- Jedná se o nízkoteplotní proces (eliminace nechtěných fázových přechodů).
- Nevytváří ostré rozhraní mezi příměsí a pevnou látkou (nejedná se o povlak).
- Dobrá technologická kontrolovatelnost a reprodukovatelnost.

Z principu metody ovšem vyplývají i její nevýhody pro průmyslové aplikace kterými zejména jsou:

- Ovlivněná vrstva dosahuje relativně nízké hloubky (desítky až stovky nanometrů).
- Jedná se o paprskovou technologii, tudíž modifikace větších a tvarově složitějších objektů je často obtížná či nerealizovatelná.
- Koncentrace příměsí je omezena vlivem odprašování svrchní vrstvy. [1] [6]

4.3 Brždění energetického atomu v pevné látce

Při interakci energetického atomu s atomem pevné látky dochází k vzájemné výměně energie, kdy urychlený atom část své energie předá atomu pevné látky a dojde k jeho vychýlení z původní trajektorie. Zjednodušeně lze na atomy pohlížet jako na hmotné body o hmotnostech M_1 a M_2 , které na sebe repulzivně působí. Toto silové působení mezi interagujícími atomy lze popsat interakčními (meziatomovými) potenciály (6.1).



Obrázek 3 Schéma binární srážky urychleného iontu s atomem pevné látky. [1]

Při srážce dvou atomů dojde tedy ke ztrátě kinetické energie letícího iontu T , která je předána atomu substrátu. Původní energie iontu E je o tuto hodnotu snížena. Zároveň dojde k vychýlení obou atomů od původního směru pohybu iontu. Při čelní srážce, dojde na základě zákona zachování hybnosti k maximální energetické ztrátě iontu dle vztahu:

$$T_{max} = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \quad (4.1)$$

Příčemž nedojde k vychýlení atomů a terčový atom se pohybuje ve směru urychleného iontu. Předaná energie a úhel vychýlení trajektorie závisí především na srážkovém parametru p . Jednoduše lze konstatovat, že čím blíže k sobě pozorované atomy jsou tím větší bude úhel vychýlení φ a předaná energie T .

Plocha mezikruží (diferenciální průřez), dána vztahem:

$$d\sigma = 2\pi p dp \quad (4.2)$$

Je to oblast, do které atom musí směřovat, dojde-li k interakci ve vzdálenosti mezi p a $p + dp$ od terčového atomu. Předaná energie potom leží mezi hodnotami T a $T + dT$. Účinný srážkový průřez σ , který definuje pružné srážky mezi hodnotami minimální T_n a maximální T_{max} předané energie lze vyjádřit vztahem:

$$\sigma = \int_{T_n}^{T_{max}} \frac{d\sigma(E, T)}{dT} dT \quad (4.3)$$

Kde člen $d\sigma(E, T)$ je diferenciální účinný průřez, který vyjadřuje pravděpodobnost iontu předat jednomu atomu vzorku část energie T ze své celkové kinetické energie E . Diferenciální účinný průřez pro pružné srážky je určen interakčním potenciálem iontu a atomu pevné látky. Známe-li průběh interakčního potenciálu, jsme schopni určit diferenciální účinné průřezy a predikovat tak závislost četnosti rozptylu na velikosti úhlu rozptylu.

Úbytek kinetické energie urychleného iontu je realizován třemi základními interakcemi, které na sobě nejsou závislé a jsou tudíž separovatelné. Celková energetická ztráta je tedy popsána součtem těchto dílčích ztrát. Jedná se o ztráty vlivem pružných srážek iontů s jádry atomů vzorku, ztráty vlivem nepružných srážek s jejich elektrony a méně významné ztráty při nichž se elektrony záporně nabitého iontu zachytí na atomech vzorku. Tedy:

$$-\frac{dE}{dx} = -\left(\frac{dE}{dx}\right)_j - \left(\frac{dE}{dx}\right)_e - \left(\frac{dE}{dx}\right)_x \quad (4.4)$$

Kde člen $-\frac{dE}{dx}$ reprezentuje úhrnný úbytek energie a jednotku dráhy v prostředí pevné látky a nazývá se brzdná schopnost substrátu (Obrázek 4). V případě zanedbání nepatrného vlivu členu $\left(\frac{dE}{dx}\right)_x$ působeného výměnou náboje interagujících atomů, bude celková brzdná schopnost substrátu dána pouze jadernou $\left(\frac{dE}{dx}\right)_j$ a elektronovou $\left(\frac{dE}{dx}\right)_e$ brzdou schopností. Tedy vztahem:

$$\frac{dE}{dx} = \left(\frac{dE}{dx}\right)_j + \left(\frac{dE}{dx}\right)_e \quad (4.5)$$

Brzdná schopnost materiálu je obecně závislá na jeho hustotě, proto lze vztah (4.5) vyjádřit analogickým zápisem:

$$\frac{dE}{dx} = N_0 S_j(E) + N_0 S_e(E) \quad (4.6)$$

Kde N_0 je počet atomů v 1cm^3 , $S_j(E)$ je brzdny účinný průřez pro jadernou brzdou schopnost a $S_e(E)$ pro elektronovou brzdou schopnost. Dílčí jadernou brzdou schopnost lze přesně vyjádřit vztahem:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_j = N_0 \int_0^{T_{max}} T d\sigma(E, T) \quad (4.7)$$

Posčítáním pravděpodobností dílčích ztrát do maximální hodnoty T_{max} a vynásobením počtem atomů v $1\text{cm}^3 N_0$ získáme celkovou brzdou schopnost jader substrátu $\left(\frac{dE}{dx}\right)_j$. V praxi se však přistupuje ke konkrétním zjednodušujícím obdobám zápisu, například:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_j = -2\pi N_0 e^{-1} Z_1 Z_2 e^2 \alpha_B \frac{M_1}{M_1 + M_2} \quad (4.8)$$

kde α_B je Bohrov stínící poloměr. Z_1 je atomové číslo implantovaného iontu, Z_2 je atomové číslo prvku substrátu a M_1, M_2 jejich hmotnosti. Člen N_0 vyjadřuje počet atomů v 1 cm^3 materiálu substrátu.

Pro popsání elektronové brzdě schopnosti musíme rozlišovat mezi interakcemi při vysokých a nízkých energiích. Diferenciální účinný průřez pro elektronovou brzdě schopnost lze vyjádřit jako:

$$d\sigma = Z_1^2 Z_2^2 e^4 \frac{M_1}{m} \frac{dT}{ET^2} \quad (4.9)$$

kde m je hmotnost elektronu.

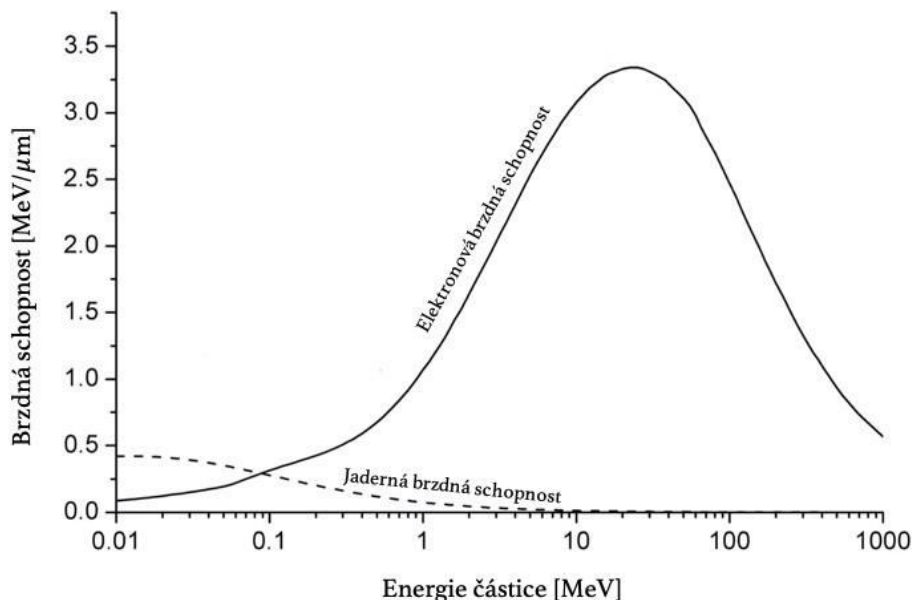
Pro vyjádření elektronové brzdě schopnosti v analogickém tvaru (4.8) pro vysoké energie je nutno definovat dolní mez integrálu jako ionizační energii elektronu. Konkrétní vztah pro výpočet je pak:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = \frac{4\pi Z_1 e^4 N_0 Z_2}{mv^2} \ln\left(\frac{2mv^2}{I_e}\right) \quad (4.10)$$

kde I_e vyjadřuje střední excitační energii a $N_0 Z_2$ hustotu elektronů materiálu substrátu. Pro nízké energie vycházíme z jiného předpokladu, kde brzdě účinný průřez je úměrný rychlosti urychleného iontu dle vztahu:

$$S_e(E) = -\frac{1}{N_0} \left(\frac{dE}{dx}\right)_e \quad (4.11)$$

[5] [4] [1] [10]



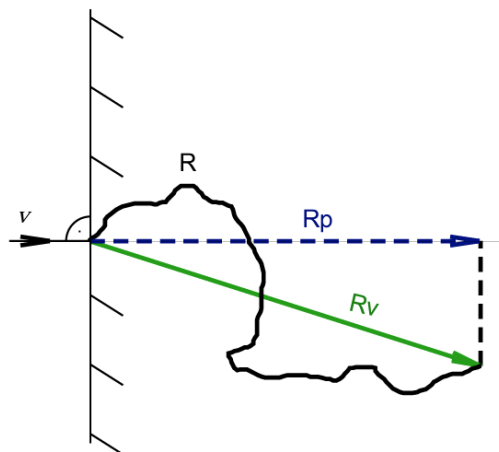
Obrázek 4 Závislost elektronové a jaderné brzdě schopnosti na energii iontů. Převzato s úpravou z [11]

Pro větší energie (rychlosti) iontů převládají energetické ztráty vlivem elektronového brzdného procesu, naopak při energiích nižších se více uplatňují ztráty působené jaderným bržděním (Obrázek 4). [4]

4.4 Koncentrační profil

Celková trajektorie, kterou energetický atom vykoná po vstupu do substrátu se nazývá dosah R (range). Kvůli náročnosti získání této hodnoty, se v praxi pracuje s experimentálně měřitelnou hodnotou promítnutý dosah R_p (projected range). Je to průmět vektorového dosahu R_v tj. přímé vzdálenosti počátečního a koncového bodu dráhy energetického atomu do směru vektoru jeho počáteční rychlosti v (Obrázek 5). Velikost předané energie a počet srážek jsou náhodné proměnné, a proto budou dosahy energetických iontů nabývat rozdílných výsledných hodnot i při zachování stejných výchozích podmínek. Dosahy se tedy u všech atomů liší a spolu tvoří statistický soubor s určitým rozdělením.

Rozdělení se obecně vyšetřuje pro dva případy, u kterých se výsledky mohou zásadně lišit. Pro implantaci do amorfních struktur je rozdělení dáno především energií iontů, fluencí, hmotnostmi a atomovými čísly terčových a urychlovaných atomů, teplotě a hustotě pevné látky. Druhý případ uvažuje pevnou látku jako monokrystalickou. Rozdělení tudíž závisí také na úhlu, pod kterým urychlené atomy dopadají na povrch pevné látky. Je-li totiž iontový svazek rovnoběžný s nějakým krystalografickým směrem, mohou ionty do pevné látky pronikat značně hlouběji (4.5).



Obrázek 5 Schematické znázornění dosahů R , R_v , R_p . [1]

Teoretický dosah implantovaných iontů R lze určit na základě znalosti celkové brzdné schopnosti materiálu $\left(\frac{dE}{dx}\right)_c$ vztahem:

$$R = \int_0^E \frac{dE}{\left(\frac{dE}{dx}\right)_c} \quad (4.12)$$

Vztáhneme-li hloubku implantace atomů příměsi k procentuálnímu zastoupení vzhledem k celkovému počtu atomů látky získáme tzv. hloubkový koncentrační profil implantované příměsi v pevné látce (Obrázek 6).

Teoretický výpočet dosahů energetických atomů je velmi složitý, proto se v praxi přistupuje ke zjednodušujícím předpokladům, kdy lze koncentrační profil uspokojivě popsat Gaussovým rozdělením s maximem v určité hloubce pod povrchem. K tomu je zapotřebí znát pouze promítnutý dosah R_p a směrodatnou odchylku ΔR_p . Zastoupení příměsi v pevné látce $N(x)$ je pak dáno vztahem:

$$N(x) = \frac{\phi}{\Delta R_p \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2} \right] \quad (4.13)$$

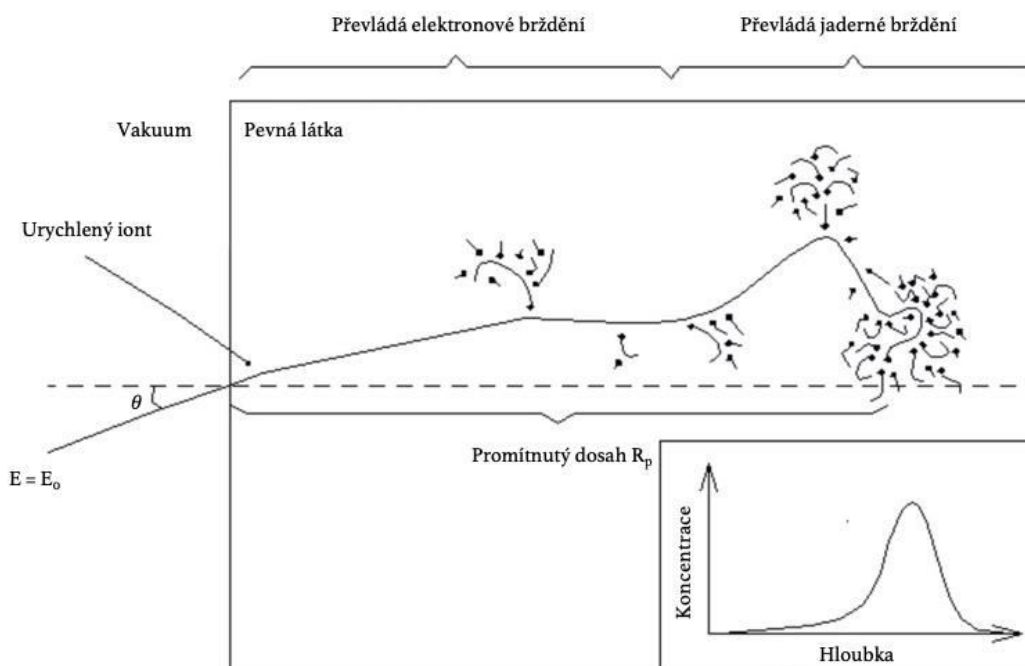
kde ϕ je fluence. Přibližná hodnota směrodatné odchylky při nízkých energiích implantovaných iontů a podmínky $M_1 > M_2$ je dána vztahem:

$$\Delta R_p \approx 0,35 R_p \frac{2\sqrt{M_1 M_2}}{M_1 + M_2} \quad (4.14)$$

za stejných podmínek jsme také schopni určit poměr dosahů R_p a R ze vztahu:

$$\frac{R_p}{R} = \left(1 + \frac{M_1}{3M_2} \right)^{-1} \quad (4.15)$$

Takto teoreticky vypočítané koncentrační profily se mnohdy liší od experimentálně zjištěných. Gaussova aproximace s sebou přináší zanedbání vlivů efektů probíhajících v modifikovaném povrchu. Patří mezi ně zejména odprašování svrchní vrstvy substrátu, difuze či vznik a následný pohyb defektů (dislokace, vakance, intersticiál). Při zvyšování fluence se například zvýší i množství odprašovaných atomů terčiku a maximum koncentrace implantované směsi se pak nachází blíže povrchu. U monokrystalických látek může dosah ovlivnit i jev iontového kanálování (4.5). [1] [12] [6]

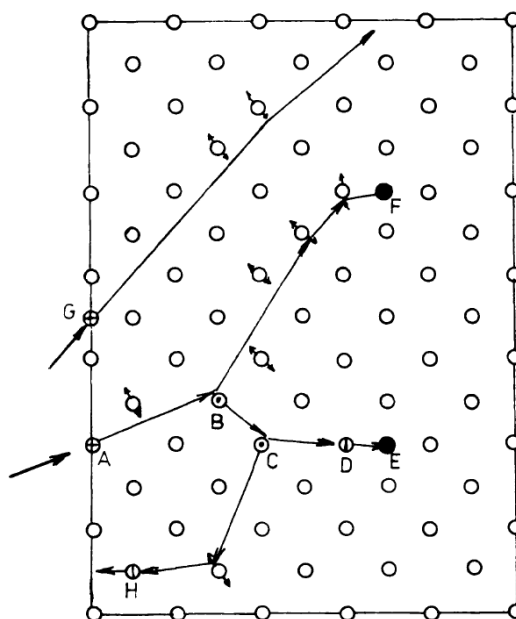


Během elektronového brzdného procesu energetický atom v pevné látce nemění významně svůj směr. Po dostatečném snížení jeho energie vlivem nepružných srážek s elektrony pevné látky začne převládat jaderné brždění, které má za následek výraznější změny trajektorie letícího iontu (Obrázek 6). [11]

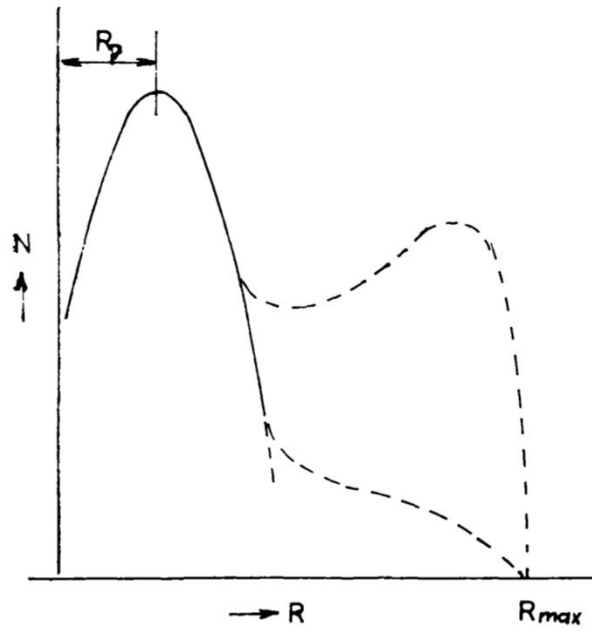
4.5 Efekt iontového kanálování

Iontové kanálování je efekt, který se za jistých podmínek může vyskytnout při implantování do substrátů krystalických struktur, či do struktur krystalů obsahujících. Pokud mají rozměry krystalů obdobnou velikost jako hloubka implantace, může v jistých krystalografických směrech docházet k hlubšímu pronikání iontů do substrátu s nižším působením defektů. Krystalové uspořádání se v určitých rovinách jeví méně husté a vytváří se zde volné kanálky, ve kterých na putující iont příměsí působí atomy substrátu značně menšími silami (Obrázek 7).

V případech těchto struktur bude proto výsledný koncentrační profil záviset i na úhlu, pod kterým ionty vnikají do substrátu (Obrázek 8). Tohoto jevu lze efektivně využít k pronikání iontů příměsí do nižších vrstev, nebo ho naopak potlačit správným nakloněním směru dopadu iontů na povrch terčíku. K potlačení jevu stačí obvykle naklonění o 7° vůči rovině kanálků. [13] [4]



Obrázek 7 Příklad brzdného procesu atomu v plošném schématu krystalové mříže. A-nastřelený atom, B, C-vakance, H-odprášený atom, E, F-intersticiály, G-kanálový atom. [7]



Obrázek 8 Příklad hloubkového koncentračního profilu. (Plnou čarou je vyznačen tvar profilu implantování do amorfni struktury. Čárkovaně jsou vyznačeny dva typické vlivy iontového kanálování). [7]

5. Titan a Ti-N systém

5.1 Titan

V zemské kůře je titan devátým nejběžnějším prvkem a vyskytuje se zde zejména ve formě oxidů. Čistý titan je lesklý tažný kov, který je za běžných teplot stálý na vzduchu. I přes jeho náročnou výrobu je titan a jeho slitiny značně využívaným konstrukčním materiálem. Kombinace jeho fyzikálních, mechanických a chemických vlastností mu propůjčuje širokou škálu uplatnění.

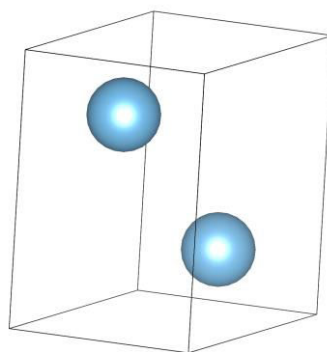
Titanové materiály se vyznačují nízkým modulem pružnosti v tahu, a proto jsou vhodné pro cyklicky namáhané součásti. Díky tenké vrstvě oxidů, tvořících se na jejich povrchu vykazují také významnou chemickou a korozní odolnost a dokážou tak vydržet v prostředí solných roztoků a kyselin. Pro své vlastnosti nachází uplatnění například v leteckém, automobilovém či biomedicíně průmyslu. [14] [15]

5.1.1 Struktura titanu

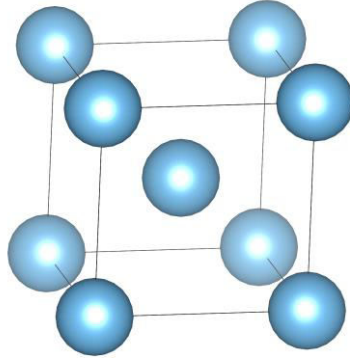
Kovy patří mezi prvky s nejjednodušší krystalickou stavbou. Krystalové soustavy jsou obecně popsány v konvenčním souřadném systému pomocí šesti základních parametrů mřížky (tři délky a , b , c a tři úhly α , β , γ). Základní délky jsou zpravidla uváděny v jednotkách Angstrom (značeno Å).

Titan je alotropický prvek, vyskytující se nejčastěji ve dvou dominantních fázích, které jsou závislé na teplotě. Fáze α má těsně uspořádanou šesterečnou (hexagonální) mřížku a je stabilní do teploty 882 °C (Obrázek 9). Nad touto teplotou dochází k fázové přeměně na modifikaci titanu β , která se vyskytuje v krychlové prostorově centrované (Stereocentrické) mřížce (Obrázek 10). S přísadovými prvky tvoří obě fáze tuhé roztoky, které mohou fungovat jako stabilizátory a stabilizovat danou fázi i mimo oblast její běžné existence. Stabilizátory α fáze jsou například dusík, uhlík či kyslík. Jako stabilizátory β fáze jsou běžně užívány například prvky železo, niob či molybden.

Některé slitiny jsou charakteristické existencí stabilní ($\alpha + \beta$) fáze. Jde například o komerčně hojně využívanou slitinu Ti6Al4V. [14] [15] [4] [16]



Obrázek 9 Elementární buňka hexagonální mřížky titanu α .



Obrázek 10 Elementární buňka stereocentrické mřížky titanu β .

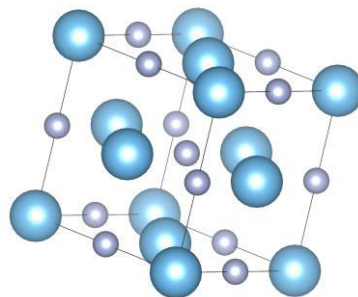
5.2 Systém Ti-N

Titan, stejně jako ostatní kovy skupiny IV B periodické tabulky prvků se vyznačuje vysokou afinitou k dusíku. Závislost tvorby příslušných fází na teplotě a nasycení materiálu s daným prvkem vyjadřuje tzv. fázový diagram.

Do jisté hodnoty koncentrace legujícího prvku v základním kovu dochází ke tvorbě tzv. tuhého roztoku, který je nejčastěji označován jako fáze α . Krystalová struktura tuhého roztoku odpovídá struktuře základního kovu tedy hexagonální mřížce. V případě titanu syčeného dusíkem se jedná

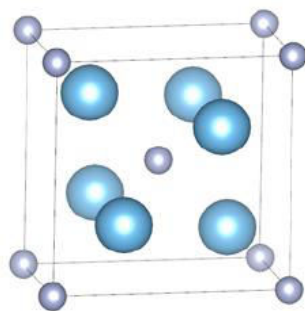
o intersticiální tuhý roztok. Ten vzniká za předpokladu, že atomy legujícího prvku jsou znatelně menší než atomy základního kovu. Atomy příměsi pak vstupují do volných (intersticiálních) prostorů mezi atomy v krystalové struktuře základního kovu. [17] Homogenní oblast α fáze je ohraničena limitní hodnotou koncentrace dusíku v okolí 22-23 %. [18] Dusík takto dokáže stabilizovat α fázi i za vyšších teplot, než je teplota tání čistého titanu (1 668 °C). Dojde-li k překročení limitní hodnoty rozpustnosti v základním kovu, začne se v mikrostruktuře kovu tvořit další (nejčastěji intermediální) fáze.

Další významnou fází Ti-N systému je tzv. fáze δ neboli nitridy TiN_x s kubickou plošně centrovanou mřížkou (typ mřížky NaCl) (Obrázek 11).



Obrázek 11 Kubická plošně centrovaná elementární buňka TiN.

Tato fáze má za nízkých teplot hranici vzniku v okolí hodnoty koncentrace dusíku 23 %. [18] Mezi těmito dvěma dominantními fázemi se nachází menší oblast tetragonálního nitridu Ti_2N tzv. fáze ϵ (Obrázek 12).



Obrázek 12 Tetragonální elementární buňka Ti_2N .

Oblast existence této fáze se pohybuje nad minimální teplotou jejího vzniku (700 °C). [19] [20] V přesné hodnotě minimální teploty se však literatura rozchází. Například J. M. Molarius a kol. ve své práci detekují fázi ϵ ve vzorku podrobeném iontové implantaci už za teplot v rozmezí 477 až 527 °C. U stejného vzorku při nižších teplotách v rozmezí 357 až 427 °C byly zjištěny pouze dominantní fáze α a δ . [20] Jsou známi i jiné méně významné fáze jakými jsou například fáze $\eta - Ti_3N_{2-x}$ či $\xi - Ti_4N_{3-x}$, které mají velmi specifické oblasti existencí. [21]

Maximální hodnota nasycení titanu dusíkem se pohybuje lehce nad hodnotou 50 %. Při dalším růstu nasycení přechází dusík do plynného stavu a z materiálu uniká.

Koeficient zaplnění (tj. poměr objemu atomu k objemu elementární buňky) elementární buňky α i δ fáze se s rostoucí koncentrací dusíku spojitě zvětšuje. V závislosti na tomto jevu dochází i ke spojitému zvětšování mřížkových parametrů elementárních buněk. [19] [18]

5.3 Implantace dusíku do slitin titanu

Dusík je pro účely implantace zajímavý, zejména pro jeho schopnost zlepšovat povrchové vlastnosti materiálů a jeho komerční dostupnost. Využívá se nejen k dopování kovů, ale i materiálů z polymerů. Dopování povrchu slitin titanu dusíkem významně zlepšuje jeho vlastnosti, jako tvrdost, hladkost, přilnavost, odolnost vůči korozi či opotřebení. [9] [5] [12]

5.3.1 Struktura titanu po dopování dusíkem

Princip a nastavené parametry metody iontové implantace ovlivňují výsledný koncentrační profil, složení dopované vrstvy a tím i její mechanické vlastnosti. Vliv na výsledné zastoupení fází má především teplota a aplikovaná fluence.

Dvěma hlavními složkami zastoupenými v ovlivněné vrstvě je nitrid titanu TiN (Obrázek 11) a intersticiální tuhý roztok titanu s dusíkem Ti(+N). Při iontové implantaci se ve většině případů tvoří fáze TiN. Výjimkou může být implantace za vyšších teplot (nad 700 °C), při kterých je možné tvořit i tetragonální fázi Ti_2N (Obrázek 12).

Tvorba TiN je podmíněna určitou minimální koncentrací dusíku v terčovém materiálu. [8] [22] Je proto závislá na aplikované fluenci a nachází se v okolí maxima koncentračního profilu, přičemž jako minimální koncentrace dusíku potřebná ke vzniku fáze TiN je uváděna hodnota 23 % [18]. Tato minimální mez není však pevně definována a v literatuře jsou různými autory uváděny rozdílné informace. [23] Tuhý roztok Ti(+N) se pak vyskytuje v oblastech s nižší koncentrací před a za

maximem. Ovlivněná oblast se proto nejčastěji skládá ze tří vrstev, které volně přecházejí do neovlivněné části s původní strukturou.

Na složení modifikované vrstvy má velký vliv aplikovaná fluence. Při jejím zvyšování dochází jak k většímu zastoupení příměsi v materiálu tak i k prohloubení celkové ovlivněné vrstvy. Při vysokých fluencích je třeba také uvažovat odprašování svrchní vrstvy a větší výskyt mřížkových poruch. Odprašování svrchní vrstvy má za následek přesunutí maxima blíže k povrchu a může vést až k úplnému zániku první vrstvy před maximem tvořené intersticiálním tuhým roztokem. To může mít za následek významnou deformaci koncentračního profilu.

Převažující fází v celkové ovlivněné vrstvě je tuhý roztok Ti(+N). Mechanismy zpevnění materiálu při iontové implantaci jsou tvorba intersticiálního tuhého roztoku Ti(+N), vznik fáze TiN či vnitřní pnutí způsobené radiačním poškozením. [8] [20] [22]

6. Simulační programy

Způsob, jakým lze předběžně získat informaci o hloubkové distribuci příměsi v pevné látce je popis dráhy částice a jejích interakcí s terčovými atomy pomocí simulačních programů. Při jejich správném použití nám mohou poskytnout užitečné informace, které lze s výhodou využít při navrhování reálných experimentů, technologických postupů či k dalším simulacím.

Programy využívají různých typů algoritmů na různé úrovni popisu meziatomárních interakcí. Existují dva základní pohledy na zjednodušení a popis trajektorie urychleného atomu v pevné látce, jimiž jsou:

1. Aproximace binární kolizí (BCA)

K popisu pohybu částice využívá algoritmů metody Monte Carlo (MC) (6.1.1) a celý proces vnikání částice do pevné látky je aproximován kaskádou nezávislých binárních srážek.

Mezi nejznámější programy využívající metody MC patří programy SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter) či TRIDYN. Existují i další méně známé obdobné programy jako například program PERST nebo SASAMAL.

2. Molekulární dynamika (MD)

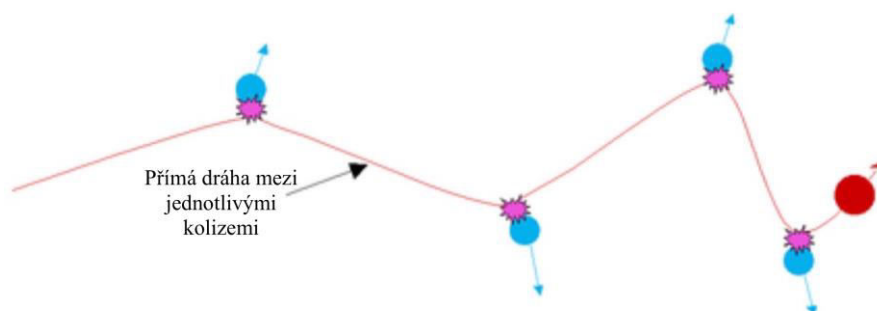
MD popisuje komplexněji síly okolních terčových atomů, které nepřetržitě působí na vnikající částici. Lze s ní tak zahrnout například i tepelné kmitání okolních atomů. Aproximace touto metodou je náročnější a používá se oproti metodě BCA pro menší soubory částic. Lze ji však s výhodou využít například pro popis interakcí nízkoenergetických atomů, kde naopak BCA selhává.

Metodu MD využívají například volně dostupný počítačový kód LAMMPS či program Materials Studio, k jehož použití je však nutné vlastnit licenci. [4] [24]

Ve své práci se budu podrobněji zabývat programy užívající metody MC, zejména pak volně dostupným programem SRIM.

6.1 Aproximace binární kolizí

Počítačové simulace popisující trajektorie energetických iontů v pevné látce pracují se zjednodušujícími předpoklady pro meziatomární kolize. Touto metodou je pohyb urychleného iontu pevnou látkou zjednodušen na sekvenci nezávislých binárních srážek s terčovými atomy, mezi kterými cestuje po přímé dráze, na které je zpomalován elektronovým brzděním (Obrázek 13).

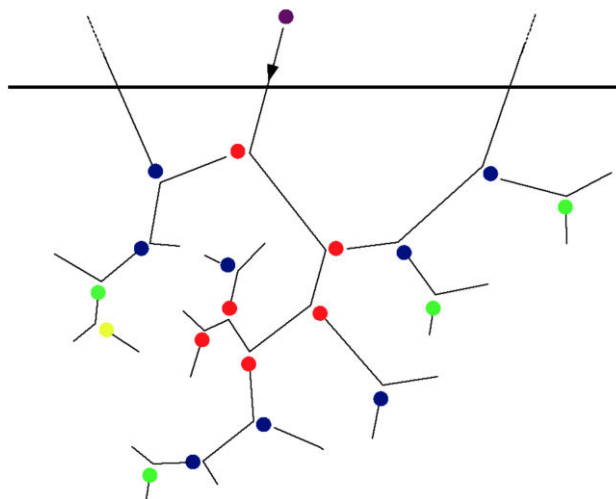


Obrázek 13 Schéma nezávislých binárních srážek mezi atomy. [11]

Úhel vychýlení ze směru letícího iontu a předaná energie po binární kolizi jsou závislé především na srážkovém parametru p (4.3). Pro určení srážkového parametru se v simulacích používají dva základní typy kódu. Aproximace binární srážky pomocí metody Monte Carlo a aproximace uvažující krystalické struktury.

Metodou Monte Carlo je srážkový parametr každé kolize vybírán náhodně na základě jeho rozložení pravděpodobnosti a závisí pouze na hustotě atomů terčového materiálu. Zejména proto je tento přístup aproximace pohybu iontu v pevné látce vhodný pro amorfní terčové materiály. S touto metodou pracuje například program SRIM. Pro simulace chování urychleného iontu v krystalických strukturách slouží složitější aproximace binární srážek. Pohybující se iont má v krystalu jasně definovanou polohu a srážkový parametr a vzdálenost k dalšímu interagujícímu atomu jednoznačně odpovídají jeho poloze v tomto krystalu. Lze jimi popsat například jev kanálování v monokrystalech. Tuto metodu aproximace využívá například program MARLOWE. Tyto způsoby zjednodušování binárních srážek jsou dostačující pro hodnoty kinetické energie v řádek keV, pro nižší hodnoty jsou méně přesné. [11] [25]

Při interakci energetického atomu s atomem substrátu může dojít k přenosu takové energie, že je tento atom ze své původní polohy vyražen a prostupuje pevnou látkou dále. Takto vyražený atom je schopen předávat dostatečnou energii i dalším atomům substrátu a proces tak opakovat. Dochází k takzvané srážkové kaskádě (Obrázek 14). Srážková kaskáda je závislá na typu struktury terče. [24]



Obrázek 14 Schéma srážkové kaskády. Fialově je znázorněn urychlený atom vstupující do pevné látky. Červeně, modře a zeleně jsou znázorněny primárně až kvartérně vyražené atomy ze svých poloh. Převzato z [11]

Programy s sebou přináší aproximativní podmínky, na základě kterých pracují. BCA například pomíjí vlivy tepelných kmitů atomů, které mohou v některých případech hrát svou roli. Neuvažují také tvoření clusterů a shluků materiálových poruch terče. Při nízkých energiích je popis pohybu částice metodou BCA též problematický, neboť vlivem nižší rychlosti letícího atomu na něj znatelněji působí interakční síly okolních atomů, jejichž projev metoda BCA zanedbává. Se snižováním energie letícího atomu dochází tedy květšímu zkreslování výsledků simulace. Při práci se simulačními programy využívajícími BCA je proto nutný jistý nadhled a znalost teoretického fungování zkoumaných jevů. Simulačně získané výsledky a data jsou proto posléze podrobovány dalším analýzám. [24] [26]

Pro simulační programy využívající metodu BCA jsou pro popis meziatomového působení používány typické interakční potenciály. Patří mezi ně i takzvané stíněné Kolumbovské potenciály, které při přibližování atomů odvozují závislost odpudivých sil na základě Columbova zákona. Při větších vzdálenostech se realizuje odstínění elektronovým obalem pomocí takzvané stínící funkce. Uvažujeme-li meziatomový interakční potenciál jako Kolumbovský potenciál pro obor krátkých vzdáleností r , lze jej obecně napsat ve tvaru:

$$V(r) = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \right) \Phi(r, a) \quad (6.1)$$

kde Z_1 a Z_2 jsou atomová čísla interagujících atomů, r je vzdálenost jejich hmotných středů, e je elementární náboj a $\Phi(r, a)$ je stínící funkce, kde a je stínící poloměr charakteristický pro parametry interagujících atomů. Nejčastěji používané potenciály jsou například Molierův, WHB (Wilson, Haggmark, Biersack) či ZBL (Ziegler, Biersack, Littmark). Všechny zmíněné potenciály lze popsat vztahem (6.1). Liší se pouze interpretací stínící funkce. [27] [28] [24]

6.1.1 Metoda Monte Carlo

Jedná se o numerickou metodu schopnou řešit libovolné matematické úlohy pomocí modelování náhodných veličin a statického odhadu jejich charakteristik. Nejběžnější postup metody je hledání takové hodnoty d , která je zároveň střední hodnotou $E(X)$ nějaké náhodné veličiny X . Metoda má své využití v matematických úlohách, kde jsou vztahy mezi prvky dány náhodnými ději. Jedná se tedy o metodu využívající se zejména v odvětvích stochastiky.

Typickými aplikacemi metody jsou například výpočet vícerozměrných integrálů, řešení soustav diferenciálních rovnic či simulování experimentů. Velký rozmach zažila metoda s příchodem počítačů, ale objev jejích základních principů sahá až do roku 1873. [29]

6.2 Simulování koncentračních profilů

Pro simulování a zpracování koncentračních profilů implantovaných iontů lze využít řadu počítačových programů, které jsou schopny numericky zpracovat chování urychleného iontu v pevné látce. Mezi nejpoužívanější patří například program SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter) nebo program TRIM (Transport of Ions in Matter). Oba vycházejí ze stejné platformy a jsou vhodné pro účely iontové implantace. Pracují na základě dynamické simulace, při které se sleduje dráha se změnou energie při opakujících se náhodných binárních kolizích atomů. Tyto programy využívají algoritmy metody Monte Carlo a jsou vhodné pro případy simulace implantace do amorfních či polykrystalických prostředí. Simulace MC neumožňují vzít v úvahu aspekty krystalických struktur, které se v řadě případů projevují do výsledné hloubkové distribuce implantované příměsi. Tyto projevy jsou však v mnohých případech zanedbatelné a jejich vlivy lze minimalizovat či potlačit úplně. Simulace MC jsou tedy schopny poskytnout relativně důvěrná data i pro krystalické struktury a jsou pro ně majoritně využívány zejména pro prvotní aproximace. [11] [1] [4]

Dynamickou verzí programu TRIM je program TRIDYN či jeho novější verze SDTrimSP, která je kombinací obou. S v názvu tohoto programu značí statický, D dynamický a SP znamená možnost volby mezi sekvenčním či paralelním módem programu. [30] [31] Dalšími programy, které lze k účelům předpovědi distribuce četnosti využít mohou být například program SASAMAL nebo PERST. Oba zmíněné programy jsou však obdobou programu TRIM. [1]

Vytváření modelů a simulací dějů na molekulární úrovni nám může poskytnout užitečné vědomosti o hloubce a rozložení distribuované příměsi a modifikaci oblastí podrobených implantací. Z těchto teoreticky získaných znalostí lze s úspěchem odhadnout neznámé veličiny k nastavování vhodných experimentálních parametrů či dalším simulacím.

6.3 Program SRIM

Stopping and Range of Ions in Matter (SRIM) je skupina počítačových programů (psána ve Visual Basic 5.0) užívaná k simulacím interakcí iontů s pevnou látkou. Program byl vytvořen v roce 1983 a postupně vylepšován až do roku 1998 a stále je dostupný ke stažení na jakékoli zařízení s operačním systémem Windows.

Ke své funkci využívá metody simulace Monte Carlo pro aproximaci binárních srážek s náhodnou volbou srážkového parametru každé meziatomární kolize. Podprogramem SRIMu je program Transport of ions in matter (TRIM), který je populární v oborech iontové implantace, ale i v ostatních odvětvích zabývajících se ozařováním materiálů. Materiál terče je uvažován jako spojitě amorfní prostředí definované hustotou vybraného prvku (či kombinace prvků) a třemi parametry vazebných energií atomů. Terčový materiál může být tvořen i více takovými vrstvami o různých tloušťkách.

Uživatel má možnost skrze grafické rozhraní (Obrázek 15), které program TRIM nabízí, zvolit vstupní parametry a požadovaná výstupní data. Jako volitelné vstupní parametry, pro které bude simulace provedena je požadováno urychlovací napětí, typ iontu a typ terčového materiálu, který může být v jedné až osmi rozdílných vrstvách. Po zvolení prvku iontu je programem automaticky vyplněna tabulka jeho vlastností (uvažovány jsou nejběžnější izotopy), parametry jako hmotnost či

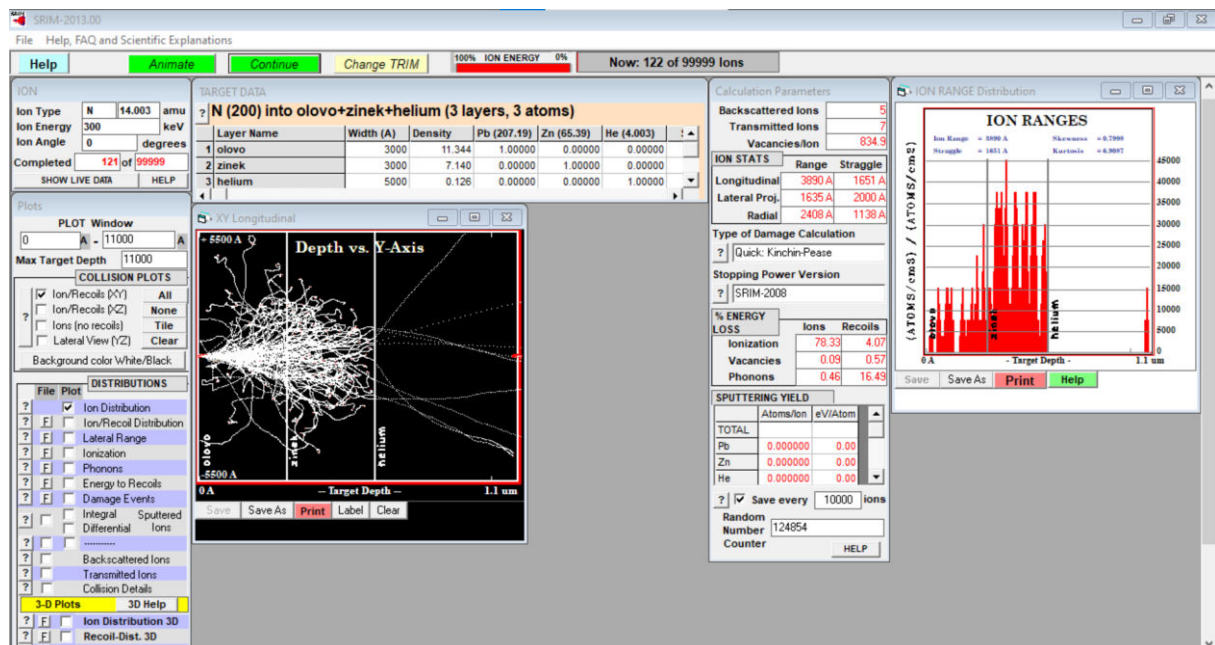
atomové číslo lze měnit. Podobně program zachází i s volbou prvku terče (je tedy možná i simulace do plynného terče), kde mimo zmíněné vlastnosti lze do jisté míry měnit i brzdné vlastnosti materiálu. Nastavit lze také různé typy výpočtu, pro které chceme simulaci provést. Výpočet může pak být detailnější v kýžených ohledech a opomenout aspekty, které zrovna nejsou zapotřebí (např. ztráta energie iontů, detaily srážkových kaskád), tím dojde i ke zrychlení celkové doby simulace.

Jako primární výstup program vykreslí či vypíše třídímní rozložení implantované příměsi v terčovém materiálu. Dalšími možnými výstupy mohou být například hloubka dosahu, rozprostření příměsi od původního místa vniku paprsku iontů do terče, dále informace o terčovém materiálu, jakými jsou rozložení poruch (vakance), ionizace, tvorba fononů a informace o energetických ztrátách iontu elektronovým a jaderným brzděním.

Změnou typu kalkulace je také možné získat podrobné informace o kaskádě interakcí každého iontu s pevnou látkou. Pro každou simulaci lze vybrat jaká výstupní data jsou požadována, takže program nemusí ukládat data, která uživatel nevyžaduje. Kalkulace programu mohou zabrat delší dobu v řádu až několika hodin, proto je možné kdykoli simulaci pozastavit a posléze pokračovat dále.

Data a jejich grafické znázornění jsou ukládána po každém implantovaném iontu a lze je v reálném čase sledovat. V průběhu simulace je možné měnit některé zadané vstupní parametry (hustota terče, urychlovací napětí, úhel dopadu paprsku, typ iontů atd.) a s těmito novými parametry dále pokračovat. Hlavní výhodou programu je, že uživateli poskytuje rychlé výpočty a výsledky s dobrou přesností.

Jedním z dalších základních zjednodušujících předpokladů programu je plně amorfni terčový materiál. Nelze jím proto popsat některé jevy, vyskytující se při dopování materiálů s krystalickými strukturami (např. iontové kanálování (4.5)). Program není schopen popsat ani shlukování materiálových poruch terče nebo tepelné chvění jeho atomů. [11] [26] [32]



Obrázek 15 Grafické rozhraní programu TRIM.

Instalace programu na zařízení s novějšími verzemi Windows může být složitá. Na webových stránkách programu je však návod s několika postupy, podle kterých lze program nainstalovat. Tvůrci program vybavili podrobnými dílčími informacemi ke všem inputům a outputům a celkově je program velmi uživatelsky přívětivý.

7. Praktická část

Dopovaný materiál během procesu iontové implantace mění spojitě svou hustotu. Tím se pro vstupující energetické atomy stává méně propustným a dosah těchto atomů se snižuje (roste brzdná schopnost materiálu). Dochází tak k deformaci výsledného koncentračního profilu, která se projevuje přiblížením maxima koncentrace blíže k povrchu dopovaného vzorku. Program SRIM během simulace pracuje s konstantní hustotou terče a není tak schopen tuto deformaci uvažovat ve výsledném koncentračním profilu implantované příměsi.

Pro zanesení vlivu změny hustoty materiálu během implantace do výsledného koncentračního profilu bylo v programu SRIM provedeno jedenáct simulací pro rozdílné hodnoty hustoty terče. Tyto teoreticky stanovené hodnoty hustoty terče byly vypočteny pro koncentrace příměsi od 0 do 50 % (krok 5 %).

Na základě obdržných dat bylo vytvořeno sedm teoretických koncentračních profilů pro sedm různých hodnot fluence. Získané teoretické koncentrační profily uvažující změnu hustoty terče byly ve výsledku porovnány s koncentračním profilem z první simulace pro nulovou koncentrací dusíku.

7.1 Předpoklady výpočtu teoretické hustoty terče

V rámci teoretického zanesení vlivu změny hustoty terče během dopování byly uvažovány následující předpoklady výpočtu:

- Materiál terče byl uvažován jako čistý titan α bez mřížkových poruch.
- Zadaný materiál byl uvažoval jako amorfni a pro dílčí simulace byla v celé hloubce vzorku uvažována konstantní hustota.
- Jako dopant byl zvolen dusík
- Teoretický průběh hustoty v závislosti na koncentraci dusíku byl rozdělen na tři oblasti (Obrázek 19):
 - Oblast 1 – od 0 do 10 % koncentrace dusíku
 - Oblast 2 – od 10 do 25 % koncentrace dusíku
 - Oblast 3 – od 25 do 50 % koncentrace dusíku
- Rozměry terče byly uvažovány dle tabulky níže (Tabulka 1).
- Hodnoty molárních hmotností titanu a dusíku užití ve výpočtech a simulacích byly uvažovány dle tabulky níže (Tabulka 2).

Tabulka 1 Parametry terče.

Parametry terče	[cm]
Šířka a	1
Délka b	1
Hloubka c	0,000025

Tabulka 2 Hodnoty molárních hmotností prvků Ti a N.

Typ prvku	Molární hmotnost [g/mol]
Titan	47,867
Dusík	14,0067

7.2 Změna hustoty terče

K teoretickému stanovení hustoty jakéhokoliv materiálu je potřeba znát hmotnost a objem jeho elementární buňky. Objem elementární buňky je definován tvarem krystalické mřížky. Její hmotnost je dána hmotností atomů, které se v ní nacházejí. Podílem těchto veličin získáme hustotu elementární buňky a tím i hustotu daného materiálu.

V případě materiálu podrobeného iontové implantaci se mění jeho chemické složení a dochází tak ke změně hmotnosti i objemu jeho elementárních buněk. Tím se v důsledku mění hustota. Průběh hustoty v závislosti na koncentraci se dle výpočtů dělí na tři oblasti, ve kterých se liší.

- První oblast, ohraničena hodnotami koncentrace dusíku od 0 do 10 % je dána strmým nárůstem krystalových parametrů elementární buňky tuhého roztoku titanu s dusíkem.
- Druhá oblast je vymezena hodnotami koncentrace dusíku od 10 do 25 %. Růst krystalových parametrů elementární buňky tuhého roztoku je zde oproti první oblasti výrazně pomalejší.
- Třetí oblast je vymezena hodnotami koncentrace dusíku od 25 do 50 % a dochází zde majoritně ke tvorbě fáze δ .

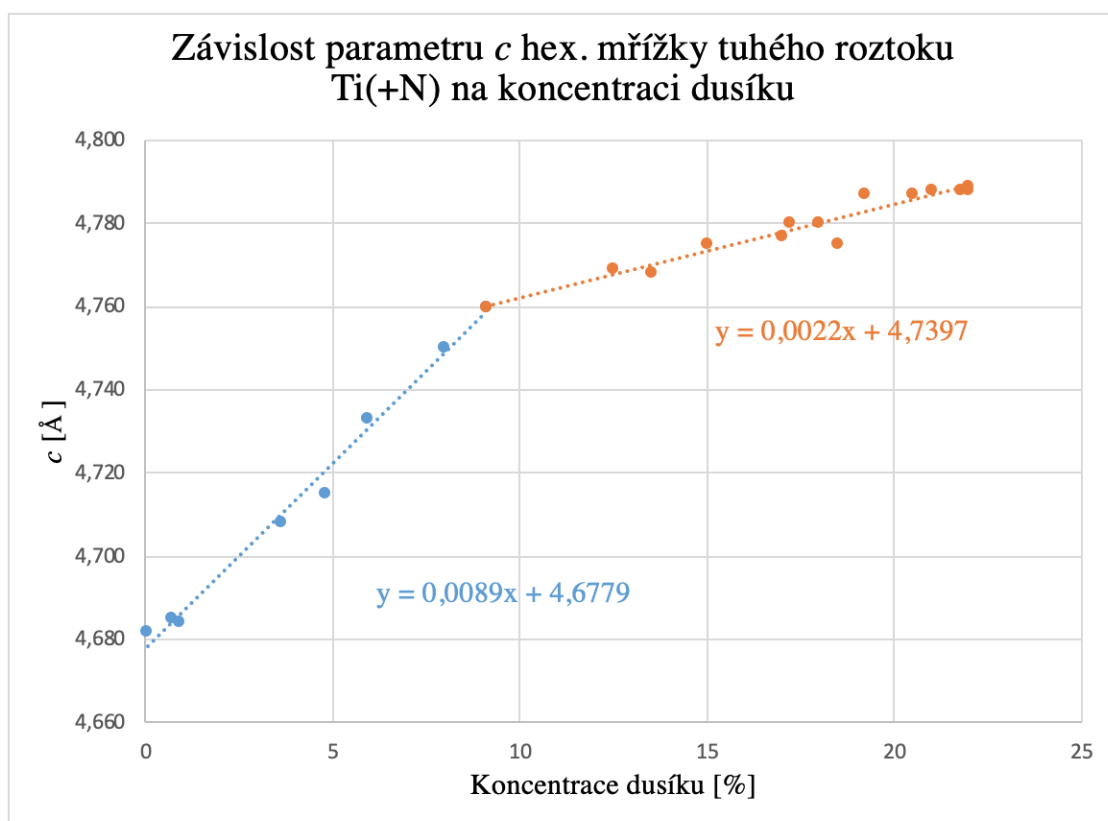
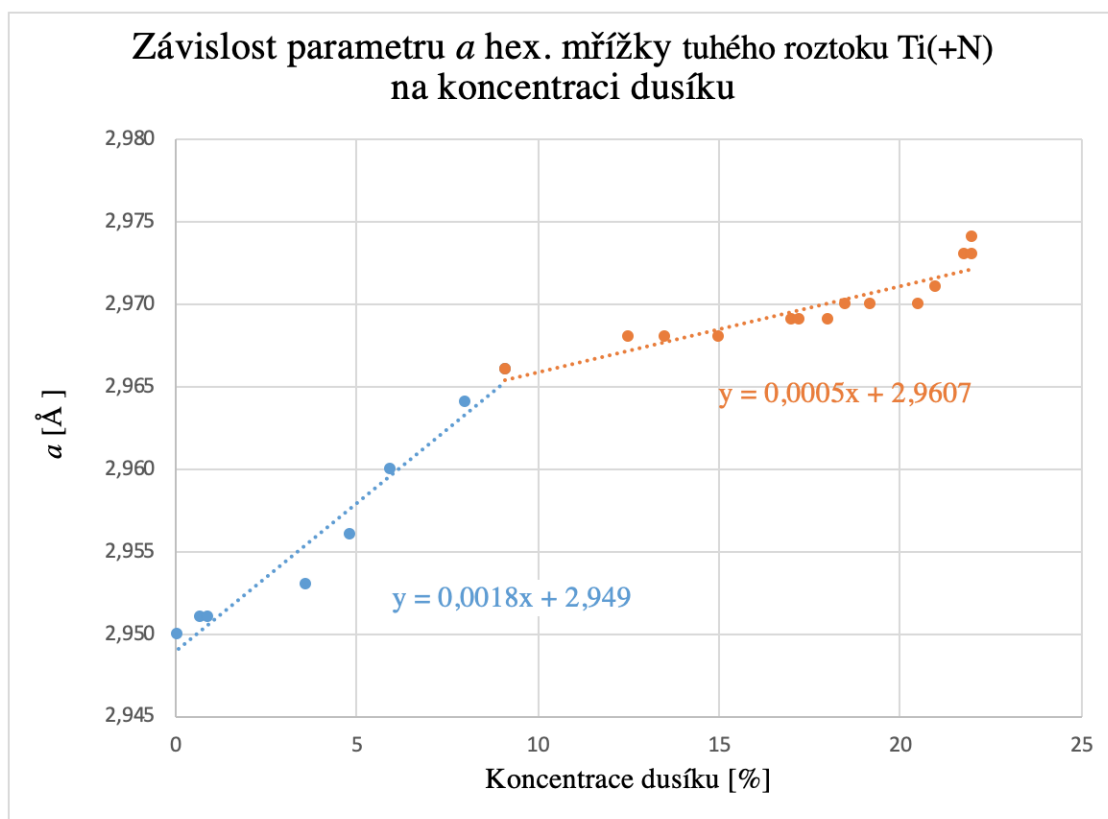
7.2.1 Změna hustoty terče vlivem tvorby tuhého roztoku (oblast 1 a 2)

J. P. Bars a kol. ve své práci zkoumali závislost mřížkových parametrů elementární buňky fáze α na koncentraci dusíku v celé její oblasti homogenity. [18] Výsledky jejich měření jsou uvedeny v tabulce níže (Tabulka 3).

Tabulka 3 Experimentálně změřené mřížkové parametry a a c elementární buňky tuhého roztoku Ti(+N) v závislosti na koncentraci dusíku. [18]

Koncentrace dusíku C_N [%]	Parametr a [Å]	Parametr c [Å]
0,05	2,950	4,682
0,7	2,951	4,685
0,9	2,951	4,684
3,6	2,953	4,708
4,8	2,956	4,715
5,95	2,960	4,733
8	2,964	4,750
9,1	2,966	4,760
12,5	2,968	4,769
13,5	2,968	4,768
15	2,968	4,775
17	2,969	4,777
17,2	2,969	4,780
18	2,969	4,780
18,5	2,970	4,775
19,2	2,970	4,787
20,5	2,970	4,787
21	2,971	4,788
21,8	2,973	4,788
22	2,974	4,789
22	2,973	4,788

Grafické znázornění naměřených hodnot krystalových parametrů v závislosti na koncentraci dusíku je patrné z obrázku níže (Obrázek 16). Graf pokrývá celou oblast homogenity fáze α .



Obrázek 16 Závislost mřížkových mřížky parametrů a a c tuhého roztoku Ti(+N) na koncentraci dusíku.

Z grafického znázornění je patrný zlom v okolí hodnoty 9-10 % koncentrace dusíku. Před i za tímto zlomem byly naměřené hodnoty aproximovány lineární funkcí metodou nejmenších čtverců. Mřížkové parametry v závislosti na koncentraci dusíku v tuhém roztoku jsou tedy teoreticky popsány vztahy:

- Od 0 do 9 %:

$$a = 1,8 * 10^{-3} C_N + 2,949 \quad (7.1)$$

$$c = 8,9 * 10^{-3} C_N + 4,6779 \quad (7.2)$$

- Od 9 do 22 %:

$$a = 0,5 * 10^{-3} C_N + 2,9607 \quad (7.3)$$

$$c = 2,2 * 10^{-3} C_N + 4,7397 \quad (7.4)$$

Na základě vztahů (7.1) a (7.2) byly dopočítány teoretické rozměry krystalových parametrů pro určené hodnoty koncentrací dusíku v tuhém roztoku do 10 %. A na základě vztahů (7.3) a (7.4) pak rozměry krystalových parametrů od 15 do 25 % (Tabulka 4).

Tabulka 4 Teoreticky vypočítané mřížkové parametry "a" a "c" elementární buňky tuhého roztoku Ti(+N) pro dané hodnoty koncentrace dusíku.

Koncentrace dusíku C_N [%]	a [Å]	c [Å]
0	2,949	4,6779
5	2,958	4,7224
10	2,967	4,7669
15	2,9682	4,7727
20	2,9707	4,7837
25	2,9732	4,7947

Vzhledem k tvaru elementární buňky daného tuhého roztoku (Obrázek 9) je její objem dán vztahem:

$$V = a^2 c \sqrt{3/4} \quad (7.5)$$

Kde a a c jsou krystalové parametry (a – délka hrany, c – výška). Hmotnost elementární buňky daného tuhého roztoku byla stanovena na základě vztahu:

$$m = \frac{2 * m_{Ti} + 2 * C_N * m_N}{N_A} \quad (7.6)$$

Kde m_{Ti} a m_N jsou molární hmotnosti titanu a dusíku, C_N je koncentrace dusíku v terči a N_A je Avogadrova konstanta. Hustota elementární buňky je pak dána podílem těchto dvou veličin vztahem:

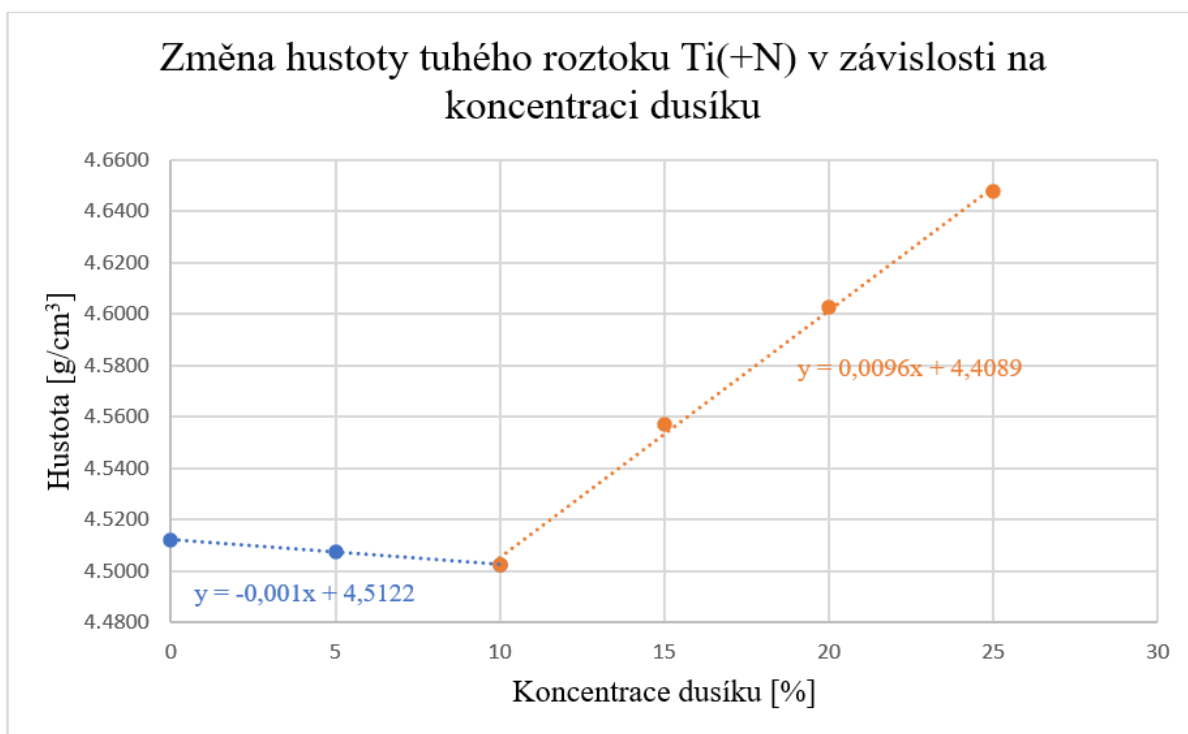
$$\rho = \frac{m}{V} \quad (7.7)$$

Na základě vztahů (7.5), (7.6) a (7.7) byly dopočteny hodnoty objemu, hmotnosti a hustoty elementární buňky tuhého roztoku v patřičných jednotkách v závislosti na daných hodnotách koncentrace dusíku v terči pro oblasti 1 a 2 (Tabulka 5).

Tabulka 5 Hodnoty objemu, hmotnosti a hustoty elementární buňky tuhého roztoku pro dané hodnoty koncentrace dusíku (oblast 1 a 2).

Koncentrace dusíku C_N [%]	V [Å ³]	m [g]	ρ [g/cm ³]
0	35,2315	1,5897E-22	4,5122
5	35,7841	1,61296E-22	4,5075
10	36,3414	1,63622E-22	4,5024
15	36,4151	1,65948E-22	4,5571
20	36,5605	1,68274E-22	4,6026
25	36,7063	1,70599E-22	4,6477

Grafické znázornění průběhu hustoty tuhého roztoku Ti(+N) na koncentraci dusíku v terči je patrné na obrázku níže (Obrázek 17).



Obrázek 17 Závislost hustoty tuhého roztoku Ti(+N) na koncentraci dusíku v terči.

V první oblasti průběhu změny hustoty (tj. od hodnoty koncentrace dusíku 0 až 10 %) je patrný mírný pokles hustoty popsáný vztahem:

$$\rho = -0,001C_N + 4,5122 \quad (7.8)$$

Tento jev je dán rychlejším nárůstem objemu elementární buňky vůči nárůstu její hmotnosti. Ve druhé oblasti (tj. od hodnoty koncentrace dusíku 10 až 25 %), kde je růst krystalových parametrů s rostoucí koncentrací dusíku pomalejší, je patrný strmý nárůst hustoty popsáný výrazem:

$$\rho = 0,0096C_N + 4,4086 \quad (7.9)$$

7.2.2 Změna hustoty terče vlivem tvorby fáze δ (oblast 3)

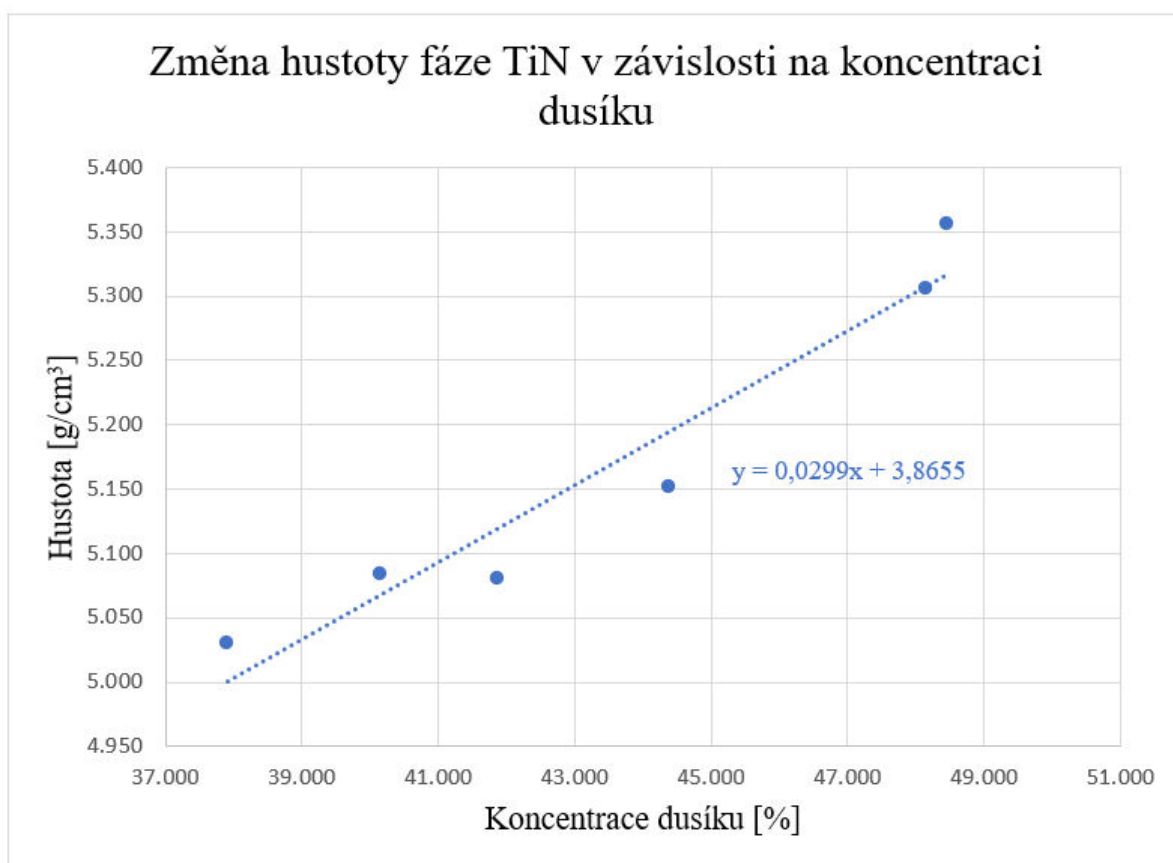
Po dosažení určité limitní hodnoty rozpustnosti, se v materiálu začne tvořit fáze δ s kubickou plošně centrovanou mřížkou (Obrázek 11). Tato limitní hodnota se nachází v okolí 23% koncentrace dusíku. Podobně jako u fáze α dochází s rostoucím zastoupením dusíku k deformaci elementární buňky a krystalový parametr a , definující kubickou mřížku fáze δ , spojitě roste. [20] S rostoucí koncentrací dusíku roste i hustota této fáze.

S. Nagakura a kol. měřili hustotu nitridu TiN (fáze δ) a jejich výsledky jsou zapsány v tabulce níže (Tabulka 6) [33].

Tabulka 6 Závislost hustoty fáze TiN na koncentraci dusíku.

Koncentrace dusíku C_N [%]	Hustota TiN [g/cm^3]
37,92	5,029
40,15	5,084
41,87	5,080
44,38	5,151
48,15	5,306
48,46	5,356

Grafické znázornění průběhu hustoty fáze δ na koncentraci dusíku v terči je patrné z obrázku níže (Obrázek 18).



Obrázek 18 Změna hustoty fáze TiN v závislosti na koncentraci dusíku

Z grafického znázornění vyplývá lineární růst hustoty s koncentrací dusíku, který lze aproximativně popsat rovnicí:

$$\rho = 0,00299C_N + 3,8655 \quad (7.10)$$

Rovnice (7.10) byla použita pro stanovení teoretické hustoty terče pro dané koncentrace dusíku od 30 do 50 % (Tabulka 7).

Tabulka 7 Hustota fáze TiN pro dané hodnoty koncentrace dusíku.

Koncentrace dusíku C_N [%]	Hustota TiN [g/cm ³]
30	4,763
35	4,912
40	5,062
45	5,211
50	5,361

7.2.3 Výsledné hodnoty hustoty

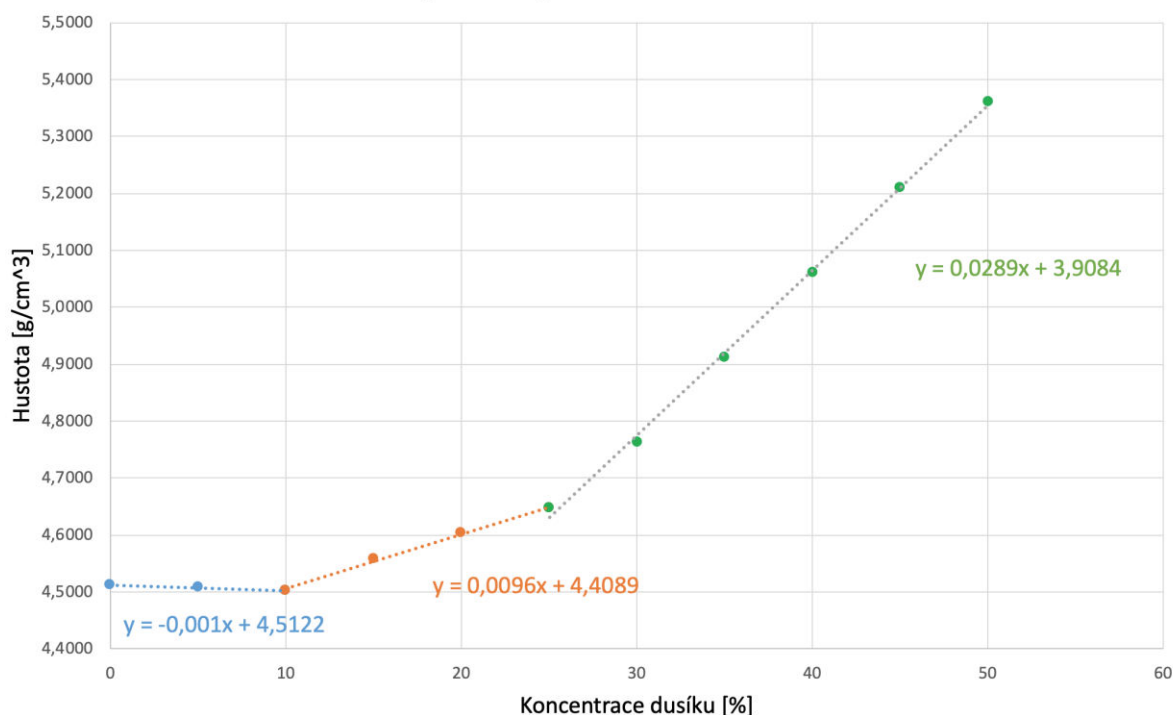
Výsledné hodnoty hustoty pro dané koncentrace dusíku jsou sepsány v tabulce níže (Tabulka 8).

Tabulka 8 Výsledné hodnoty hustoty pro dané koncentrace dusíku.

Koncentrace dusíku C_N [%]	Hustota [g/cm ³]
0	4,512
5	4,508
10	4,502
15	4,557
20	4,603
25	4,648
30	4,763
35	4,912
40	5,062
45	5,211
50	5,361

Pro tyto hodnoty hustoty byly provedeny dílčí simulace v program SRIM. Grafické znázornění průběhu hustoty terče v závislosti na koncentraci dusíku je patrné z obrázku níže (Obrázek 19). V grafu jsou barevně odlišeny tři zmíněné oblasti průběhu změny hustoty terče.

Závislost změny hustoty terče na koncentraci dusíku



Obrázek 19 Změna hustoty terče v závislosti na koncentraci dusíku.

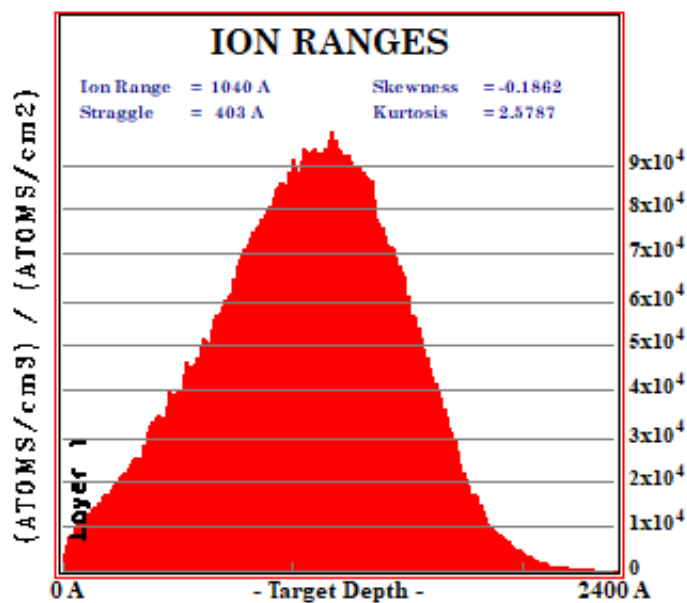
V první oblasti změny hustoty je patrný mírný pokles popsáný rovnicí (7.8). V druhé oblasti dochází k nárůstu hustoty aproximativně popsané rovnicí (7.9). Ve třetí oblasti, ovlivněné vznikem fáze δ , má nárůst hustoty nejstrmější charakter a lze jej popsat rovnicí (7.10).

7.3 Nastavení parametrů simulace

Pro všechny provedené simulace byli vstupní hodnoty až na hustotu neměnné. Molární hmotnosti titanu a dusíku byly zadány obdobně těm, užitým při teoretických výpočtech. Urychlovací napětí bylo stanoveno na hodnotu 70 keV. Hustota pro dané koncentrace dusíku byla pro dílčí simulace volena dle teoreticky stanovených hodnot shrnutých v tabulce výše (Tabulka 8). Tloušťka vrstvy dopovaného vzorku byla stanovena na 2500 Å (tj. 250 nm) a rozdělena na sto stejných dílků (po 25 Å), ve kterých byl zkoumán konečný počet atomů implantované příměsi.

7.4 Tvorba koncentračních profilů

Jako výstupní data ze simulace vypíše program SRIM koncentraci dané příměsi v terči (Osa y) v závislosti na hloubce (osa x) (Obrázek 20).



Obrázek 20 Vykreslená výstupní data ze simulace programu SRIM (Osa x hloubka [Å], osa y koncentrace příměsi [atomy/cm³]).

Posčítáním hodnot na ose y z několika simulací provedených pro různé hustoty v daných hloubkách a jejich následným přenásobením vhodným koeficientem je možné vytvořit nové hodnoty na ose y respektující změnu hustoty terče. Jako koeficient přenásobení byla uvažována reciproká hodnota počtu simulací užitých ke tvorbě daného koncentračního profilu.

V programu bylo provedeno jedenáct simulací pro hodnoty koncentrací příměsi od 0 do 50 % s krokem 5 %. Z dat obdržených ze simulací bylo následně vytvořeno sedm teoretických koncentračních profilů respektujících změnu hustoty terče. Každý z těchto koncentračních profilů byl vytvořen pro rozdílnou hodnotu fluence. S rostoucí fluencí dochází totiž ke zvyšování celkové koncentrace příměsi v terči. Výsledná koncentrace příměsi v materiálu terče určuje zastoupení vzniklých fází a tím i jeho hustotu. Například při implantování s nižšími hodnotami fluence ($(1 \text{ a } 2) \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$) je výsledná koncentrace příměsi nižší a nemusí nutně docházet ke tvorbě fází vyskytujících se nad touto hodnotou koncentrace. Pro zohlednění tohoto efektu při tvorbě hloubkových profilů, byly pro dané hodnoty fluencí započítána pouze data odpovídající příslušné výsledné koncentraci příměsi v terči.

K určení teoretické výsledné koncentrace pro dané fluence je nutné znát počet atomů v objemu terče. Známe-li tento počet atomů a užitou fluenci, jsme schopni z poměru těchto dvou hodnot získat celkové procentuální zastoupení příměsi v objemu terče. Z parametrů terče (Tabulka 1) tvaru kvádrů byl dle rovnice níže (7.11) stanoven jeho objem $V = 2,5 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^3$.

$$V = a * b * c \quad (7.11)$$

Hustota titanu v příslušných jednotkách (atomy/cm³) byla získána z programu SRIM a odpovídá teoreticky stanovené hustotě čistého titanu (Tabulka 9).

Tabulka 9 Hustota titanu.

Hustota Ti [g/cm ³]	Hustota Ti [atomy/cm ³]
4,5122	5,676E+22

Počet atomů v objemu terče je tedy dán vztahem (7.12) a odpovídá hodnotě $P = 1,419 * 10^{18}$ atomů.

$$P = (\text{Hustota Titanu [atomy/cm}^3]) * (\text{Objem terče } V [\text{cm}^3]) \quad (7.12)$$

Uvažujeme-li fluenci jako počet implantovaných iontů dusíku, je možné výslednou koncentraci dusíku v objemu terče stanovit dle vztahu:

$$C_N = \frac{\text{Počet atomů titanu v objemu terče } P}{\text{fluence}} \quad (7.13)$$

Výsledné hodnoty koncentrace dusíku v závislosti na zvolených fluencích jsou zapsány v tabulce níže (Tabulka 10).

Tabulka 10 Celková procentuální koncentrace dusíku v terči pro dané hodnoty fluence.

Fluence [atomy/cm ²]	Koncentrace dusíku v terči [%]
1E+17	7
2E+17	14
3E+17	21
4E+17	28
5E+17	35
6E+17	42
7E+17	49

Užitý způsob stanovení koncentrace příměsi v terči nereflektuje její reálné rozložení (Gaussova křivka). V okolí maxima dosahují koncentrace vyšších hodnot, a proto byly ke tvorbě hloubkových profilů pro dané fluence použity simulace provedené pro nejbližší vyšší hodnoty koncentrací příměsi. V tabulce níže jsou shrnuty parametry užití k vytvoření hloubkových profilů pro dané hodnoty fluence (Tabulka 11).

Tabulka 11 Parametry užitě ke tvorbě koncentračních profilů.

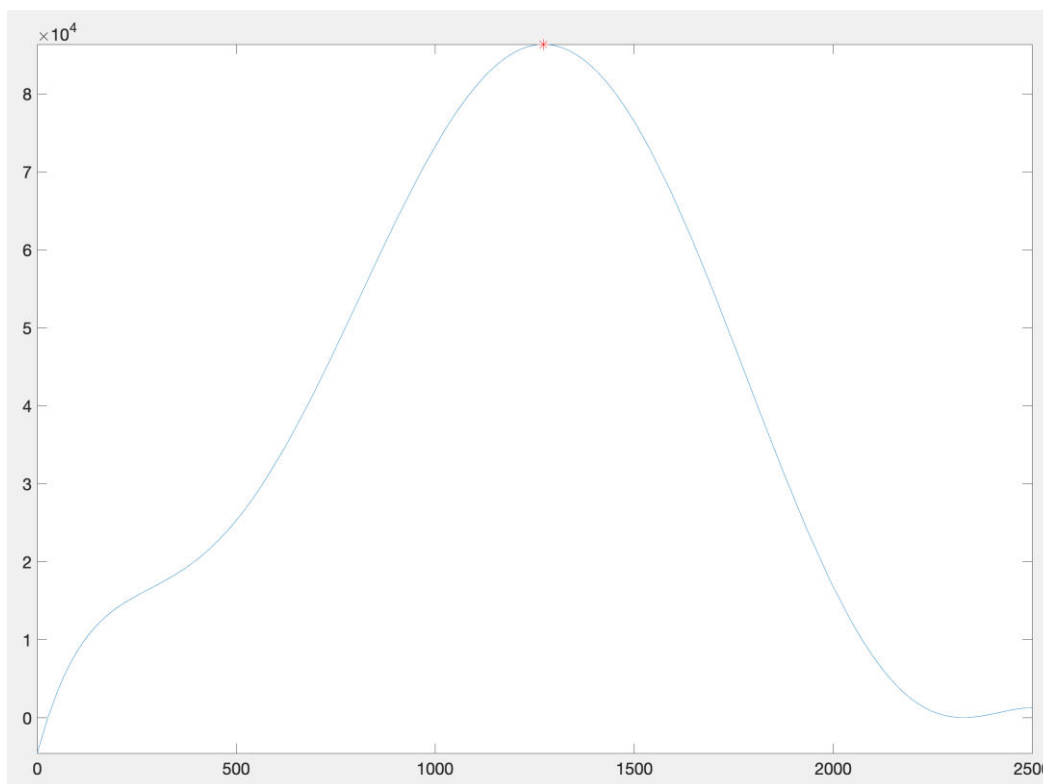
Fluence [atomy/cm ²]	Koncentrace dusíku v terči [%]	Počet použitých simulací	Koeficient přenásobení
1E+17	7,0	první 3 z 11	1/3
2E+17	14,1	první 4 z 11	1/4
3E+17	21,1	prvních 6 z 11	1/6
4E+17	28,2	prvních 7 z 11	1/7
5E+17	35,2	prvních 8 z 11	1/8
6E+17	42,3	prvních 10 z 11	1/10
7E+17	49,3	prvních 11 z 11	1/11

Data, obdržaná ze simulací byla zpracovávána v programu Excel (Obrázek 21)(viz přílohy).

Adresa složky s outputy ze simulací TRIM:		C:\output\Hustota Data_A										Fluence	1E+17	Počet dokumentů	11
První načítaný řádek dokumentu:		37										Pro vše napiš 1			
<input type="button" value="Načti"/>															
Jména dokumentů	RANGE_00N.txt	RANGE_05N.txt	RANGE_10N.txt	RANGE_15N.txt	RANGE_20N.txt	RANGE_25N.txt	RANGE_30N.txt	RANGE_35N.txt	RANGE_40N.txt	RANGE_45N.txt	RANGE_50N.txt				
počet atomů na cm ³	5,676E+22	5,670E+22	5,664E+22	5,733E+22	5,790E+22	5,847E+22	5,992E+22	6,179E+22	6,368E+22	6,555E+22	6,744E+22				
Váhové koef.	1/3	1/3	1/3	0	0	0	0	0	0	0	0				
Výsledek [atm/cm ³]	x	y1	y2	y3	y4	y5	y6	y7	y8	y9	y10	y11			
2640	25	2680,00	2640,00	2600,00	2920,00	2960,00	2800,00	3200,00	3200,00	3760,00	4040,00	4200,00			
5680	50	5680,10	5680,10	5680,10	5720,10	5840,10	5680,10	5760,10	6080,10	6120,10	6440,10	6600,10			
6560	75	6600,10	6560,10	6520,10	6600,10	6840,10	6760,10	7440,10	7520,10	8040,10	7760,10	7920,10			
8453	100	8440,10	8480,10	8440,10	8680,10	8520,10	9000,10	8880,10	10000,00	9960,10	10760,00	11840,00			
9960	125	10040,00	9920,10	9920,10	10280,00	10000,00	10160,00	11240,00	11240,00	11200,00	11040,00	10840,00			
8853	150	8800,10	8880,10	8880,10	9320,10	9120,10	9400,10	9920,10	10040,00	11160,00	11840,00	12680,00			
11133	175	11080,00	11200,00	11120,00	11520,00	11840,00	11760,00	12120,00	12640,00	13440,00	13280,00	13680,00			
11440	200	11400,00	11400,00	11520,00	11200,00	11320,00	11800,00	12920,00	14280,00	14840,00	15240,00	16520,00			
12147	225	12120,00	12240,00	12080,00	12800,00	13240,00	13760,00	14600,00	15560,00	16600,00	17120,00	17080,00			
13760	250	13960,00	13600,00	13720,00	14480,00	14440,00	14880,00	15920,00	16200,00	17000,00	18560,00	19400,00			
15547	275	15560,00	15640,00	15440,00	15480,00	15280,00	15320,00	16160,00	17960,00	19320,00	20960,00	21480,00			
15200	300	15440,00	15120,00	15040,00	15320,00	16520,00	17680,00	18640,00	19640,00	21840,00	21200,00	21640,00			
18427	325	18360,00	18360,00	18560,00	19120,00	19200,00	18920,00	18360,00	19840,00	21760,00	23560,00	25560,00			
17493	350	17520,00	17320,00	17640,00	17360,00	17960,00	18640,00	21160,00	23080,00	23640,00	25800,00	27761,00			
20613	375	20840,00	20640,00	20360,00	21920,00	22080,00	22080,00	23760,00	25240,00	25920,00	26520,00	27761,00			
21627	400	21800,00	21560,00	21520,00	21720,00	23480,00	24400,00	24160,00	24280,00	25320,00	27521,00	29721,00			
22573	425	22320,00	22760,00	22640,00	23840,00	23640,00	23440,00	23680,00	25160,00	28040,00	29681,00	31721,00			
22453	450	22720,00	22240,00	22400,00	22920,00	22960,00	23680,00	26000,00	29041,00	30601,00	32681,00	35681,00			
25653	475	25600,00	25720,00	25640,00	26560,00	26680,00	26961,00	29161,00	30881,00	33121,00	36161,00	38601,00			
27134	500	27241,00	27121,00	27041,00	27721,00	28121,00	29201,00	31681,00	34321,00	34881,00	38921,00	42161,00			
29374	525	29641,00	29281,00	29201,00	31001,00	33081,00	33241,00	31961,00	34561,00	39601,00	43121,00	43521,00			
30094	550	29921,00	30321,00	30041,00	29761,00	29401,00	31161,00	36921,00	40281,00	41041,00	43721,00	46561,00			
33214	575	33561,00	33041,00	33041,00	34961,00	35841,00	36601,00	39001,00	40041,00	41961,00	46081,00	49161,00			
36281	600	36041,00	36401,00	36401,00	37081,00	37721,00	3841,00	39841,00	42601,00	46001,00	48641,00	52681,00			
37321	625	37321,00	37481,00	37161,00	38841,00	39521,00	3841,00	40521,00	44001,00	47841,00	53001,00	54401,00			
38894	650	38681,00	38881,00	39121,00	38041,00	38641,00	41121,00	43001,00	47481,00	50481,00	53561,00	58162,00			
38761	675	38881,00	38841,00	38561,00	40561,00	42561,00	43641,00	47801,00	50401,00	51721,00	58200,00	62002,00			
43294	700	43441,00	43321,00	43121,00	44761,00	46241,00	48321,00	49161,00	50201,00	58042,00	61082,00	64522,00			
45241	725	45161,00	45521,00	45041,00	47201,00	47561,00	48881,00	50161,00	56001,00	59202,00	62362,00	68842,00			
46761	750	46921,00	46521,00	46841,00	46481,00	48041,00	48601,00	52721,00	57802,00	62322,00	67002,00	73762,00			
47801	775	48241,00	47641,00	47521,00	51161,00	51681,00	52321,00	57522,00	61442,00	66842,00	71762,00	76802,00			
50814	800	51521,00	50801,00	50121,00	53641,00	55281,00	59322,00	60682,00	65242,00	70722,00	76842,00	82482,00			
57255	825	56521,00	57562,00	57682,00	55801,00	58962,00	57642,00	62282,00	68202,00	74242,00	78722,00	81762,00			
56214	850	56681,00	55881,00	56081,00	59082,00	59562,00	62162,00	66882,00	71202,00	76402,00	78442,00	88563,00			
61069	875	61322,00	61562,00	60322,00	62802,00	62962,00	65762,00	69282,00	73042,00	76122,00	86522,00	87723,00			
63082	900	63482,00	62522,00	63242,00	66882,00	67482,00	68202,00	70002,00	73082,00	83842,00	84762,00	97163,00			
67295	925	66922,00	67762,00	67202,00	66882,00	68122,00	68642,00	69802,00	80562,00	81322,00	94243,00	93843,00			
65495	950	65842,00	65402,00	65242,00	64802,00	66202,00	69122,00	76922,00	77962,00	89643,00	91003,00	93563,00			
65562	975	65962,00	65642,00	65082,00	69722,00	74202,00	74042,00	75202,00	88403,00	90803,00	89923,00	95523,00			
73109	1000	72642,00	73242,00	73442,00	73362,00	72282,00	74762,00	84042,00	86802,00	88243,00	92683,00	98043,00			
70375	1025	70762,00	70202,00	70162,00	71242,00	77602,00	80722,00	83962,00	87963,00	88363,00	93683,00	99523,00			
77829	1050	78322,00	78122,00	77042,00	81362,00	81722,00	80162,00	85082,00	85362,00	93283,00	95923,00	105600,00			
79069	1075	78722,00	79122,00	79362,00	79442,00	81162,00	84282,00	82482,00	94243,00	95043,00	99643,00	99163,00			
80895	1100	81882,00	80722,00	80082,00	81922,00	81122,00	79522,00	87683,00	90363,00	93323,00	100200,00	100280,00			
78842	1125	77602,00	78882,00	80042,00	78442,00	79882,00	84362,00	88323,00	90963,00	99603,00	98363,00	105040,00			
79295	1150	80242,00	79402,00	78242,00	84802,00	85922,00	85682,00	90323,00	93643,00	95643,00	101560,00	102920,00			

Obrázek 21 Zpracování dat ze simulací v programu Excel.

Data získaných koncentračních profilů respektující změnu hustoty byla aproximována polynomm šestého stupně a na základě rovnice aproximativní křivky (Obrázek 22) byly v programu MATLAB určeny hodnoty maximálních koncentrací a jejich polohy na ose x (hloubka).



Obrázek 22 Aproximativní křivka koncentračního profilu pro hodnotu fluence $1 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ vykreslena v programu MATLAB. Osa x hloubka [Å], osa y koncentrace [atomy/cm³].

8. Výsledky

Výsledkem práce je sedm teoretických koncentračních profilů uvažujících změnu hustoty terče pro sedm různých hodnot fluence. Tyto získané koncentrační profily byly porovnány s koncentračním profilem první simulace (hustota $4,512 \text{ g/cm}^3$), který naopak změnu hustoty nerespektuje.

Hodnoty maximálních koncentrací a jejich polohy na ose x koncentračních profilů pro dané fluence byly porovnány s hodnotami koncentračního profilu první simulace (hustota $4,512 \text{ g/cm}^3$) (Tabulka 12).

Tabulka 12 Sledované hodnoty určené pro první simulaci (hustota $4,512 \text{ g/cm}^3$).

Sledované hodnoty první simulace pro hustotu $4,512 \text{ g/cm}^3$	
Poloha maxima [Å]	Maximální koncentrace dusíku [atomy/cm ³]
1271,2	86443

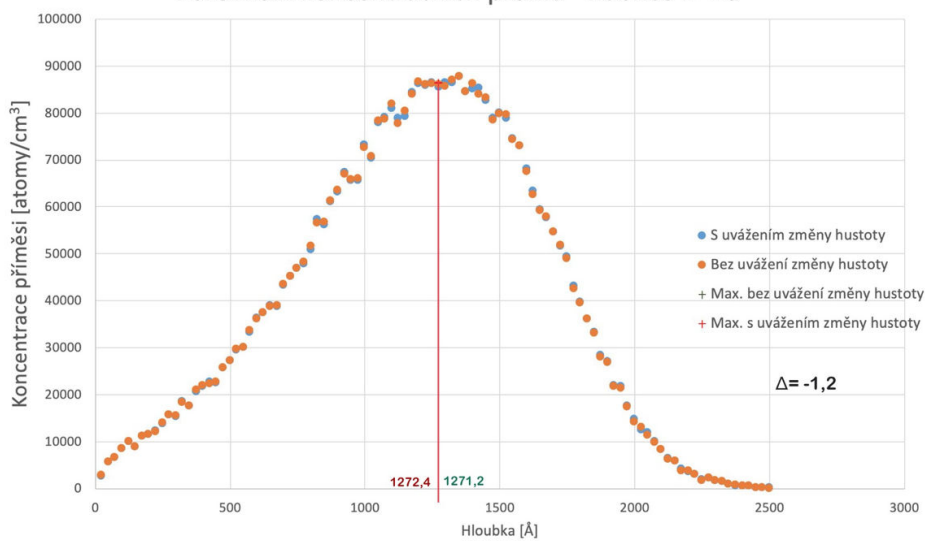
Výsledné sledované hodnoty a jejich porovnání s hodnotami z první simulace jsou zapsány v tabulce níže (Tabulka 13).

Tabulka 13 Výsledné hodnoty maximálních koncentrací a jejich poloh.

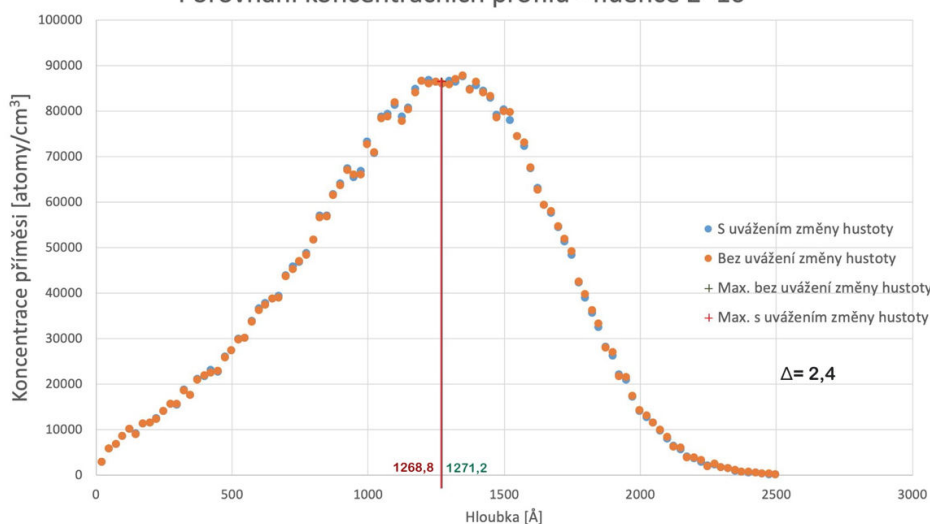
Fluence [atomy/cm ²]	Poloha maxima [Å]	Rozdíl poloh maxim [Å]	Maximální koncentrace [atomy/cm ³]	Rozdíl max. konc. Δ [atomy/cm ³]
1E+17	1272,4	-1,2	86352	-91
2E+17	1268,8	2,4	86571	128
3E+17	1258,8	12,4	87186	743
4E+17	1250,3	20,9	87647	1204
5E+17	1238,7	32,5	88197	1754
6E+17	1210,4	60,8	89274	2831
7E+17	1194,7	76,5	89732	3289

Grafické znázornění je patrné z obrázků níže (Obrázek 23) (Obrázek 24) (Obrázek 25). V grafickém znázornění jsou zvýrazněny sledované hodnoty polohy maxima a jejich rozdíl Δ [Å].

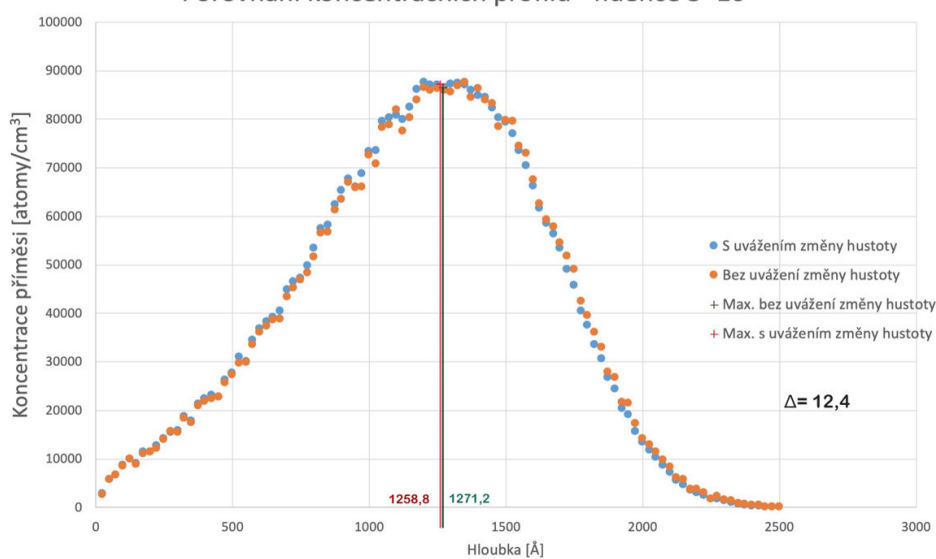
Porovnání koncentračních profilů - fluence $1 \cdot 10^{17}$



Porovnání koncentračních profilů - fluence $2 \cdot 10^{17}$

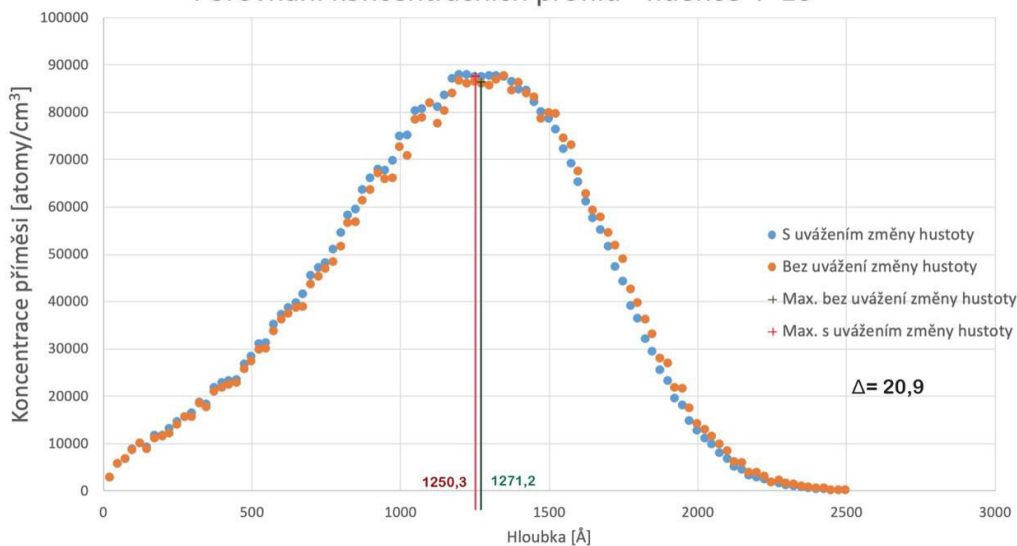


Porovnání koncentračních profilů - fluence $3 \cdot 10^{17}$

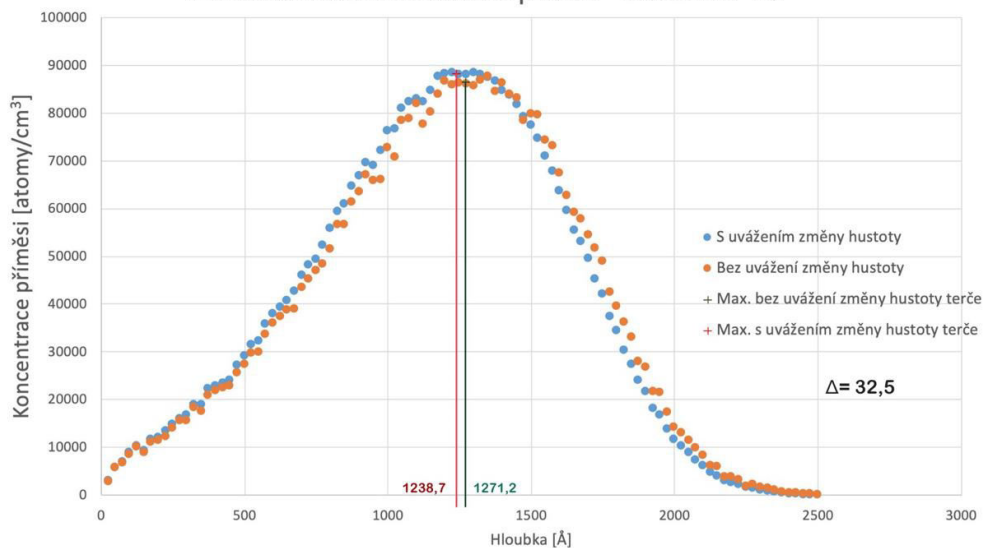


Obrázek 23 Porovnání koncentračních profilů 1.

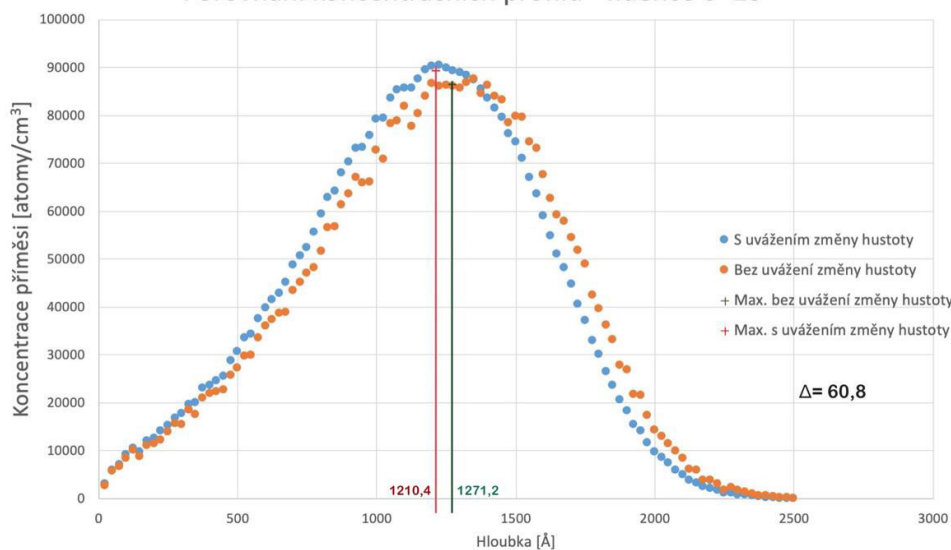
Porovnání koncentračních profilů - fluence $4 \cdot 10^{17}$



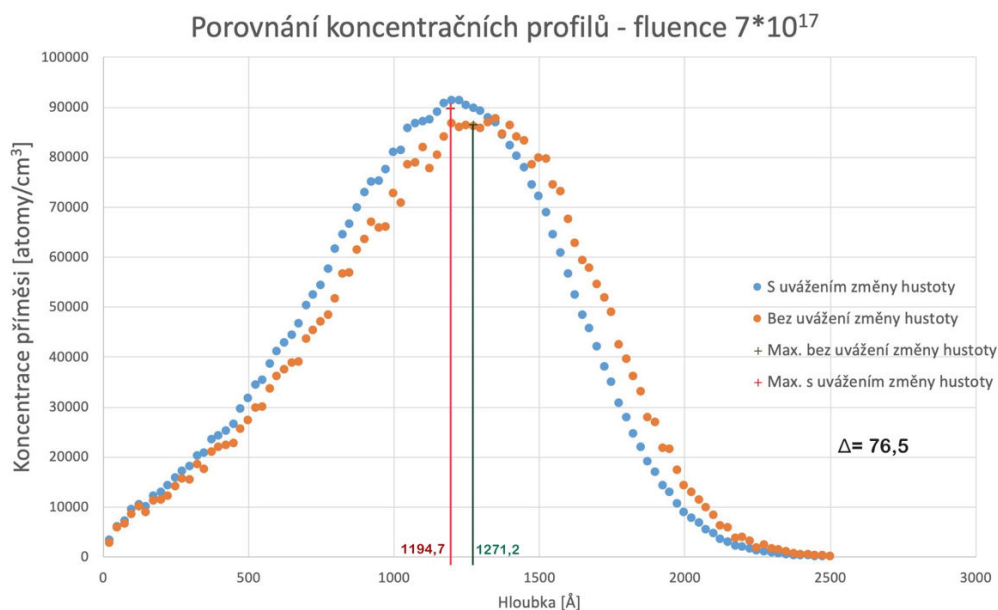
Porovnání koncentračních profilů - fluence $5 \cdot 10^{17}$



Porovnání koncentračních profilů - fluence $6 \cdot 10^{17}$



Obrázek 24 Porovnání koncentračních profilů 2.



Hodnoty polohy maxima funkcí aproximujících jednotlivé koncentrační profily mají s rostoucí fluencí (koncentrací příměsí, hustotou terče) klesající charakter a sledovaný rozdíl poloh maxim se tak zvětšuje. Maximum koncentrace se tedy přibližuje více k povrchu terče. Tento jev je zřejmější pro vyšší hodnoty fluence. Pro nižší hodnoty fluencí ($(1 \text{ a } 2) \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$) je tento efekt nepatrný.

Záporná hodnota rozdílů sledovaných hodnot u první užití fluence ($1 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$) je dána použitím simulací pro hodnoty koncentrací dusíku od 0 do 15 %. Simulace provedené pro tyto hodnoty koncentrací se majoritně nachází v oblasti, ve které má průběh hustoty mírně klesající charakter. Výsledná brzdná schopnost materiálu v této oblasti je proto nižší a energetické ionty jsou schopny hlubšího vniku do terče. Maximum koncentrace se proto nachází hlouběji pod povrchem.

8.1 diskuse

Rostoucí hustota materiálu je dána vyšší koncentrací příměsí (atomy dusíku). Program SRIM však zadaný materiál uvažuje jako čistý titan s jistou hustotou. Energetické ztráty atomů prostupujících tímto materiálem se tedy realizují pouze na základě interakcí s atomy titanu. V simulacích provedených pro vyšší hodnoty koncentrací proto může docházet k většímu zkreslování výsledků. Obdobně je ovlivněna i (maximální) koncentrace příměsí a není tak směrodatným parametrem, neboť číselně neodpovídá hodnotám užitých fluencí. Z vypočtených maximálních koncentrací lze však vyčíst, že s rostoucí hustotou terče dochází i k růstu této hodnoty.

Simulace Monte Carlo jsou nejčastěji využívány pro prvotní přiblížení a poskytují relativně hrubé informace o hloubkové distribuci implantované příměsí zejména pro krystalické struktury. Jejich porovnávání s laboratorně získanými daty s sebou proto přináší značnou chybu a je spíše informativního charakteru.

F. Burenkov a kol. ve své publikaci uvádějí tabulky průměrných promítnutých dosahů energetických iontů (R_p – projected range (Obrázek 5)) pro různé materiály a příměsí [10]. Z jejich měření iontové implantace dusíku do titanu pro urychlovací napětí 70 keV obdrželi hodnotu

průměrného promítnutého dosahu 1238 Å (123,8 nm). Porovnání této hodnoty s výsledky teoretických koncentračních profilů (Tabulka 13) je znázorněno v tabulce níže (Tabulka 14).

Tabulka 14 Srovnání výsledných hodnot s experimentálně zjištěnými daty.

Fluence [atomy/cm ²]	Poloha maxima [Å]	Abs. hod. rozdílu poloh maxim [Å]	Odchylka [%]
1E+17	1272.4	34.4	2.78
2E+17	1268.8	30.8	2.49
3E+17	1258.8	20.8	1.68
4E+17	1250.3	12.3	0.99
5E+17	1238.7	0.7	0.06
6E+17	1210.4	27.6	2.23
7E+17	1194.7	43.3	3.50

Z výsledných hodnot je patrné, že pomocí simulace bylo dosaženo relativně dobrého přiblížení k experimentálně zjištěným datům zejména pro fluence $(3; 4 \text{ a } 5) \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$. Lze také konstatovat, že simulačně získané hodnoty se pohybují v rozumných mezích. Při srovnání hodnoty polohy maxima pro první simulaci nerespektující změnu hustoty terče s experimentálně stanoveným průměrným promítnutým dosahem byla vypočtena odchylka 2,68 %. Z výsledků není proto patrné, zda teoretické koncentrační profily uvažující změnu hustoty terče odráží realitu více či nikoli.

F. Berberich a kol. ve své práci experimentálně získali hloubkový koncentrační profil dusíku v titanovém materiálu Ti6Al4V. [34] Jako výchozí parametry použily urychlovací napětí 80 keV a fluence $(1; 3; 6 \text{ a } 12) \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$. Maximum koncentrace pak leželo v hloubce 1500 Å (150nm) pod povrchem terče. Užitím vyššího urychlovacího napětí (80 keV) se maximum koncentrace nachází hlouběji pod povrchem terče, než je tomu u simulačně získaných dat. Měření F. Berbericha a kol. však opět poukazuje na relativně dobré výsledky simulací reflektující experimentálně získaná data.

9. Závěr

Teoretická část práce je věnována přehledu o iontové implantaci, systému Ti-N a možných simulačních nástrojích pro predikci hloubkové distribuce.

Pro zanesení vlivu změny hustoty terče během procesu iontové implantace do simulací programu SRIM byl vypracován jednoduchý postup teoretického určení hustoty slitiny titanu a dusíku. Užitím tohoto postupu byly získány teoretické hodnoty hustoty terče pro určené hodnoty koncentrací dusíku. Pro tyto teoreticky stanovené hodnoty hustoty byly v programu SRIM provedeny simulace iontové implantace dusíku do titanu. Data obdržaná ze simulací byla zpracována a na jejich základě byly zkonstruovány teoretické hloubkové koncentrační profily dusíku v titanovém terči pro různé hodnoty fluence, respektující změnu hustoty terče vlivem iontové implantace. Výsledky této práce jsou shrnuty v několika následujících bodech.

- Výsledný teoretický průběh změny hustoty byl rozdělen do tří oblastí, ve kterých je popsán pomocí lineárních křivek.

- Směrnice křivky popisující průběh hustoty v první oblasti je záporná a hustota zde s rostoucí koncentrací dusíku nepatrně klesá. V následujících zmíněných oblastech je charakter křivek rostoucí.
- S rostoucí koncentrací dusíku v materiálu terče dochází k posouvání maxima koncentrace blíže k povrchu. Tento jev je více patrný pro vyšší hodnoty fluencí. Naopak pro nízké hodnoty fluence ($(1 \text{ a } 2) * 10^{17} \text{ cm}^2$) je téměř nepozorovatelný.
- Z porovnávání simulačně získaných výsledků s experimentálně měřenými daty z literatury je vidět, že bylo dosaženo relativně dobrého přiblížení a výsledné hodnoty se pohybují v rozumných mezích.
- Výsledkem práce je také přiložený soubor Excel naprogramovaný pro jednoduché načítání dat ze simulací programu SRIM a jejich následné vykreslení do teoretického koncentračního profilu na základě zvolené fluence.

Užití zjednodušujících předpokladů při výpočtech a zpracování dat vnáší do výsledků systematickou chybu. Trendy výsledků však do značné míry korespondují s citovanou literaturou.

U reálných experimentů dochází k odprašování svrchní vrstvy dopovaného materiálu, tepelnému pohybu atomů, radiačnímu poškození a dalším jevům. Vlivem těchto jevů dochází k deformacím koncentračního profilu. Užitý program SRIM s těmito jevy nepracuje a ani ve výpočtech nebyly nijak zohledněny. Reálné výsledky zejména u vyšších fluencí by proto mohly dosahovat větších rozdílů při porovnávání s teoretickými predikcemi. Práce by proto dále mohla být rozšířena o reálné experimenty provedené pro obdobné parametry užití při simulacích a následné porovnání reálných výsledků s teoreticky stanovenými.

Seznam použité literatury

1. VLČÁK, P. *Studium variant metody IBAD pro modifikaci povrchových vlastností titanové slitiny*. Praha: 2012. Disertační práce. Fakulta strojní, Ústav fyziky.
2. AGHAJANI, H. a MOTLAGH, M. S. Effect of temperature on surface characteristics of nitrogen ion implanted biocompatible titanium. In: *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*. Iran: 2017. Dostupné také z: <http://link.springer.com/10.1007/s10856-016-5843-x>
3. AHMAD, I. a AKRAM, W. *Ion Implantation - Research and Application*. Pakistan: InTech, 2017. ISBN 978-953-51-3237-0. Dostupné také z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0009261417303809>
4. LEBEDA, M. *Simulace iontové implantace*. Praha: 2020. Diplomová práce. Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Katedra inženýrství pevných látek.
5. RAUTRAY, T. R. NARAYANAN, R. a KIM, K.H. Ion implantation of titanium based biomaterials. In: *Progress in Material Science*. Elsevier, 2011 sv. 56, s. 1137-77. ISSN 00796425. Dostupné také z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0079642511000430>
6. *Iontová implantace - nástroj budoucnosti* [online]. [cit. 2021-03]. Dostupné z: http://www-troja.fjfi.cvut.cz/~drska/edu/webfyz/ion_implant/
7. SETVÁK, M. *Pokroky matematik, fyziky a astronomie*. 22. ed. Praha: Jednota českých matematiků a fyziků, 1977.
8. JINDRA, J. *Vyhodnocování vrstev titanových slitin dopovaných dusíkem*. Praha: 2019. Diplomová práce. České vysoké učení technické v Praze, Fakulta strojní.
9. AUGULIS, M. *Dopování titanových materiálů dusíkem*. Praha: 2017. Bakalářská práce. ČVUT. Dostupné také z: <https://dspace.cvut.cz/bitstream/handle/10467/72989/F2-BP-2017-Augulis-Marek-Augulis%20Marek%20-%20Bakalarska%20prace.pdf?sequence=1&isAllowed=y>
10. A.F.BURENKOV, F. F. K. M. A. K. M. M. T. *Tables of ion Implantation Spatial Distributions*. Minsk: V.I. Lenin Belorussian state university minsk, 1980.
11. Worddisk. *Worddisk.com* [online]. [cit. 2021]. Dostupné z: <https://worddisk.com>
12. VLČÁK, P. HORAŽDOVSKÝ, T. VALENTA, R. a KOVAČ, J. Evolution of the nitrogen depth distribution in an implanted titanium alloy with a surface carbon In: *Chemical Physics Letters*. Elsevier, 2017 sv. 679, s. 25-30. ISSN 00092614. Dostupné také z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0009261417303809>
13. GOORSKY, M. *Ion Implantation*. Rijeka (Croatia): InTech, 2012. ISBN 978-953-51-0634-0.
14. KLAPTOVÁ, A. *Mechanické vlastnosti titanových slitin*. Brno: 2012. Bakalářská práce. Vysoké učení technické v Brně, Ústav materiálových věd a inženýrství.

15. JONÁKOVÁ, M. *Medicíální použití titanu*. Pardubice: 2017. Bakalářská práce. Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická.
16. KOLEKTIV, L. P. A. *Nauka o materiálu I*. Akademické nakladatelství CERM, s.r.o. 2003. ISBN 80-7204-283-1.
17. VOJTĚCH, D. *Kovové materiály*. Praha: VŠCHT Praha, 2006. 80-7080-600.1.
18. J. P. BARS, D. D. E. E. J. D. titanium-nitrogen solid solution formed by high temperature nitriding: diffusion of nitrogen, 1983, s. 1537-43.
19. H. A. WRIEDT, J. L. M. The N-Ti (Nitrogen-Titanium) system. 1987, s. 378-88.
20. J. M. MOLARIUS, A. S. K. E. O. R. Ti-N phases formed by reactive ion plating. 1985, s. 2419-25.
21. LECLAIR, P. R. *Titanium Nitride Thin Films by the Electron Shower*. 1998. Bakalářská práce. Massachusetts institute of technology, Department of Materials Science and Enengineering.
22. P. BUDZYNSKI, A. A. Y. J. S. Surface modification of Ti-6Al-AV alloy by nitrogen ion implation. 2006, s. 1271-76.
23. ETCHESSAHAR E. B. J.. D. J. Ti-N system: Equilibrium between the δ , ϵ and α phases and the conditions of formation of the In: *Journal of the Less Common Metals*. 1987.
24. R. BEHRISCH, W. E. *Sputtering by Particle Bombardment: Experiments and Computer Calculations from Threnshold to MeV* B.m.: Springer Science & Business Media, 2007. ISBN 978-3-540-44500-5.
25. SMITH, R. *Atomic and Ion Collisions in Solids and Surfaces: Theory, Simulation and Applications*. Cambradge university Press, 1997.
26. ZIEGLAR, J. F.. P. B. *Stopping and range of Ions in Matter*. 1983.
27. DUDA, I. R. *ANALÝZA NANOSTRUKTUR METODOU TOF-LEIS*. Brno: 2015. Vysoké učení technické v Brně.
28. W. ECKSTEIN, S. H. D. H. B. F. *Influence of the interaction potential on simulated sputtering and refledata*. Zeitschrift für Physic D Atoms, Molecules and clusters, 1992.
29. JIŘÍ DŘÍMAL, D. T. A. B. *ÚVOD DO METODY MONTE CARLO*. Brno: přírodovědecká fakulta Masarykova univerzita, 2006.
30. W. ECKSTEIN, R. D. A. M. R. S. *SDTrimSP: A Monte-Carlo Code for Calculating Collision Phenomena in Randomized Targets*. Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, 2007.
31. POSSELT, W. M. A. M. *TRIDYN_FZR User Manual*. Drážďany: 2001.
32. R.E.STOLLER, M. B. T. G. S. W. A. G. C. S. D. F. A. G. On the use of SRIM for computing radiation damage exposure. In: *Elsevier*. 2013.
33. S. NAGAKURA, T. K. F. K. Y. H. Lattice parameter of the non-stoichiometric compound TiNx. In:

Journal of Applied Crystallography. 1975.

34. F. BERBERICH, W. M. U. K. N. S. A. M. Mechanism of degradation of surface hardening at elevated temperature in TiAlV-alloys by in situ In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. 2003.
35. IVO NEZBEDA, J. K. M. K. *Úvod do počítačových simulací*. 2. upr. Vyd. Praha: Karolinum, 2003.
36. FRANTIŠEK FABIAN, Z. K. *Metoda Monte Carlo a možnosti jejího uplatnění*. Praha: Prospektrum, 1998.
37. LEACH, A. R. *Molecular Modelling: Principles and applications*. 2nd ed. Harlow: Prentice Hall, 2001.
38. DAAN FRENKEL, B. S. *Understanding molecular simulation: from algorithms to applications*. 2nd ed. San Diego: Academic Press, 2002.
39. NOVÁK, J. *Fyzikální chemie: bakalářský a magisterský kurz*. Praha: Vydavatelství VŠCHT, 2008.
40. H. SCHMIDT, A. S. M. S. B. B. COMPOUND FORMATION AND ABRASION RESISTANCE OF ION-IMPLANTED Ti6Al4V. In: *Acta Materialia*. 2001, s. 487-95.

Seznam obrázků

Obrázek 1 Interakce urychlených iontů s pevnou látkou. [1]	16
Obrázek 2 Zjednodušené schéma iontového implantátoru. Převzato s úpravou z [8].....	17
Obrázek 3 Schéma binární srážky urychleného iontu s atomem pevné látky. [1]	18
Obrázek 4 Závislost elektronové a jaderné brzdné schopnosti na energii iontů. Převzato s úpravou z [11].....	20
Obrázek 5 Schematické znázornění dosahů R , R_v , R_p . [1]	21
Obrázek 6 Schéma brždění energetického atomu v pevné látce. Převzato s úpravou z [11]	23
Obrázek 7 Příklad brzdného procesu atomu v plošném schématu krystalové mřížky. A-nastřelený atom, B, C-vakance, H-odprášený atom, E, F-intersticiály, G-kanálový atom. [7].....	24
Obrázek 8 Příklad hloubkového koncentračního profilu. (Plnou čarou je vyznačen tvar profilu implantování do amorfni struktury. Čárkovaně jsou vyznačeny dva typické vlivy iontového kanálování). [7]	24
Obrázek 9 Elementární buňka hexagonální mřížky titanu α	25
Obrázek 10 Elementární buňka stereocentrické mřížky titanu β	26
Obrázek 11 Kubická plošně centrovaná elementární buňka TiN.....	26
Obrázek 12 Tetragonální elementární buňka Ti_2N	27
Obrázek 13 Schéma nezávislých binárních srážek mezi atomy. [11].....	29
Obrázek 14 Schéma srážkové kaskády. Fialově je znázorněn urychlený atom vstupující do pevné látky. Červeně, modře a zeleně jsou znázorněny primárně až kvartérně vyražené atomy ze svých poloh. Převzato z [11]	30
Obrázek 15 Grafické rozhraní programu TRIM.....	33
Obrázek 16 Závislost mřížkových mřížky parametrů a a c tuhého roztoku Ti(+N) na koncentraci dusíku.....	37
Obrázek 17 Závislost hustoty tuhého roztoku Ti(+N) na koncentraci dusíku v terči.	40
Obrázek 18 Změna hustoty fáze TiN v závislosti na koncentraci dusíku	41
Obrázek 19 Změna hustoty terče v závislosti na koncentraci dusíku.	43

Obrázek 20 Vykreslená výstupní data ze simulace programu SRIM (Osa x hloubka [Å], osa y koncentrace příměsi [atomy/cm ³]).....	44
Obrázek 21 Zpracování dat ze simulací v programu Excel.	46
Obrázek 22 Aproximativní křivka koncentračního profilu pro hodnotu fluence $1 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ vykreslena v programu MATLAB. Osa x hloubka [Å], osa y koncentrace [atomy/cm ³].....	47
Obrázek 23 Porovnání koncentračních profilů 1.	49
Obrázek 24 Porovnání koncentračních profilů 2.	50
Obrázek 25 Porovnání koncentračních profilů 3.	51

Seznam tabulek

Tabulka 1 Parametry terče.	34
Tabulka 2 Hodnoty molárních hmotností prvků Ti a N.	35
Tabulka 3 Experimentálně změřené mřížkové parametry a a c elementární buňky tuhého roztoku Ti(+N) v závislosti na koncentraci dusíku. [18]	36
Tabulka 4 Teoreticky vypočítané mřížkové parametry "a" a "c" elementární buňky tuhého roztoku Ti(+N) pro dané hodnoty koncentrace dusíku.....	38
Tabulka 5 Hodnoty objemu, hmotnosti a hustoty elementární buňky tuhého roztoku pro dané hodnoty koncentrace dusíku (oblast 1 a 2).	39
Tabulka 6 Závislost hustoty fáze TiN na koncentraci dusíku.	41
Tabulka 7 Hustota fáze TiN pro dané hodnoty koncentrace dusíku.....	42
Tabulka 8 Výsledné hodnoty hustoty pro dané koncentrace dusíku.....	42
Tabulka 9 Hustota titanu.....	44
Tabulka 10 Celková procentuální koncentrace dusíku v terči pro dané hodnoty fluence.	45
Tabulka 11 Parametry užití ke tvorbě koncentračních profilů.	46
Tabulka 12 Sledované hodnoty určené pro první simulaci (hustota $4,512 \text{ g/cm}^3$).	47
Tabulka 13 Výsledné hodnoty maximálních koncentrací a jejich poloh.	48
Tabulka 14 Srovnání výsledných hodnot s experimentálně zjištěnými daty.....	52

Seznam použitého softwaru

- Office 365 pro Plus
- SRIM
- VESTA
- MATLAB