

©1994 г.

## РАДИАЦИОННОЕ ВВЕДЕНИЕ ДЕФЕКТОВ ФРЕНКЕЛЯ В ИДЕАЛЬНЫЙ КРИСТАЛЛ

*И.Р.Ентинзон, Г.Л.Шевченко, В.М.Огенко*

Институт химии поверхности Академии наук Украины,  
252028, Киев, Украина  
(Получена 1 марта 1994 г. Принята к печати 29 апреля 1994 г.)

Уточнена диффузионная модель радиационного образования разделенных пар Френкеля в идеальном кристалле: рассмотрено размножение дефектов в результате атом-атомных соударений и учтена дополнительная энергия, затрачиваемая на первый скачок первично выбитого атома из узла в междоузлие. Определена вероятность образования разделенной пары Френкеля  $W(T)$  ( $T$  — избыточная кинетическая энергия атома), устраняющая известное различие между экспериментальной и теоретической зависимостями сечения образования дефектов  $\sigma(E)$  ( $E$  — энергия быстрого электрона) в кристаллах Si и Ge.

Вычислению скорости радиационного введения разделенных пар Френкеля ( $V$ , вакансия +  $I$ , межузельный атом) посвящено значительное количество теоретических работ [1–8]. Однако вычисляемые сечения образования радиационных дефектов, как правило, значительно — в несколько раз и более — превышают их экспериментально определяемые значения. В настоящее время стало достаточно понятным [9–12], что причина такого расхождения связана не только с наличием в кристалле слабо связанных атомов [6], снижающих величину «пороговой» энергии смещения  $T_d$ , но и с использованием неверного выражения (1) для вероятности образования разделенной пары Френкеля  $W(T)$  при передаче атому избыточной кинетической энергии  $T$  в результате его соударения со сторонней быстрой частицей:

$$W(T) = \begin{cases} 0, & T < T_d \\ 1, & T > T_d \end{cases}, \quad (1)$$

где  $T_d$  определяется экспериментально как максимальная энергия, переданная атому быстрой частицей с энергией  $E_d$ , начиная с которой становится заметным нарастание скорости образования дефектов с ростом энергии  $E$  атакующей частицы. В работе [9] была предложена

диффузионная модель образования радиационных дефектов в идеальном кристалле, из которой следует, что вероятность  $W(T)$  зависит от энергии первично выбитого атома сложным образом, существенно отличающимся от ступенчатого распределения (1). Путем подбора численных значений трех характерных параметров теории была восстановлена вероятность  $W(T)$  и устранено тем самым известное различие между экспериментальной и теоретической зависимостями сечения образования дефектов  $\sigma(E)$  в результате упругого рассеяния быстрых электронов энергии  $E$  на атомах кристаллов кремния и германия. Указанные параметры имеют самостоятельное значение, поскольку характеризуют кристалл. Однако в связи с рядом предположений теории их следует считать ориентировочными, требующими уточнения при более последовательном рассмотрении. Такое рассмотрение предпринято в настоящей работе, а именно, здесь в модель радиационного дефектообразования введен учет размножения дефектов в результате атом-атомных столкновений и пересмотрено в связи с этим выражение для сечения дефектообразования  $\sigma(E)$ , а также учтена дополнительная энергия  $\tau$ , затрачиваемая на первый скачок первично выбитого атома из узла в междоузлие.

Атом, получивший в результате упругого столкновения с быстрой сторонней частицей достаточно большую энергию  $T + \tau$ , выбивается из нормального положения в узле кристалла и совершает ряд скачков, теряя избыточную кинетическую энергию  $T$  на соударения с окружающими атомами. При этом на первый скачок первично выбитого атома из узла в междоузлие затрачивается дополнительная энергия  $\tau$ . Атом-атомные соударения приводят к рождению новых «горячих» атомов, энергия которых  $T'$  достаточна для выхода из нормального положения в узле  $T' > \tau$ , при этом вероятность сохранения исходного направления движения атакующей частицы первично выбитым атомом довольно быстро (примерно за 7 скачков) достигает значения 0.4 [9]. Поэтому считая, что актуальное число соударений при образовании дефекта значительно больше 7, и используя модель соударений твердых шаров, будем приближенно рассматривать движение «горячего» выбитого атома как диффузию с равновероятным распределением направлений последовательных скачков.

Если к моменту размена энергии атома до некоторого значения  $T_f$ , при котором дальнейшие перескоки выбитого атома по междоузлиям становятся невозможными, атом окажется удаленным от исходного узла на достаточно большое расстояние  $R > R_d$ , то образуется разделенная пара Френкеля, компоненты которой — генетическая вакансия  $V$  и межузельный атом  $I$  — свободны и в результате дальнейшей тепловой (либо туннельной) диффузии могут вступать в реакции с примесными атомами, образуя вторичные радиационные дефекты. Длина радиуса  $R_d$  — свободный параметр настоящей модели. Вероятность образования дефекта Френкеля в результате случайного блуждания атома энергии  $T$  была получена ранее [9] в виде следующего выражения:

$$W(T) = 1 - \frac{2}{\pi} \int_0^P y \left\{ \int_0^\infty \sin(yx) \left( \frac{\sin x}{x} \right)^N x dx \right\} dy =$$

$$= 2^{1-N} \left\{ \sum_{0 \leq k < \frac{N-P}{2}} \frac{(-1)^k (N-P-2k)^N}{k!(N-k)!} + PN \sum_{0 \leq k < \frac{N+P}{2}} \frac{(-1)^k (N+P-2k)^{N-1}}{k!(N-k)!} \right\}, \quad (2)$$

где  $P = R_d/l$  — расстояние  $R_d$ , выраженное в единицах средней длины одного скачка,  $N$  — число последовательных атом-атомных соударений, приводящее к снижению избыточной энергии быстрого атома от начальной величины  $T$  до критической  $T_f$ . Если приближенно считать [9], что случайные скачки атома по междоузлиям сопровождаются потерей одной и той же доли энергии  $\alpha$ , то число скачков  $N$  равно

$$N = \frac{\ln(T/T_f)}{\ln(1-\alpha)}. \quad (3)$$

Оценка справедливости предположения о постоянстве доли передаваемой энергии в атом-атомном соударении,  $\alpha = \text{const}$ , проведенная в работах [9,10], показала, что при не слишком высоких энергиях  $T \simeq 10^2 \div 10^4$  эВ величина  $\alpha \simeq 0.15 \div 0.20$ , т.е. слабо зависит от  $T$ . При малых энергиях атома, порядка нескольких  $T_d$  или меньше, более точным является приближение, приводящее к  $\alpha = 0.33$  [10]. Если не учитывать размножение дефектов в результате атом-атомных соударений, то вкладом в дефектообразование соударений при таких малых энергиях можно пренебречь и приближение  $\alpha = \text{const}$  приемлемо [9]. При учете размножения дефектов это заранее неясно, поскольку, несмотря на низкую вероятность образования дефектов  $W(T)$  при малых  $T$ , за счет большого количества низкоэнергетических атомов, рожденных в атом-атомных соударениях, весьма вероятно усиление роли низкоэнергетического дефектообразования. Поэтому здесь подойдем более реалистически — представим искомую величину  $\alpha$  в виде убывающей функции от  $T$ ,  $\alpha = \alpha(T)$ . Естественно, это приводит к пересмотру выражения (3) и уточнению всей процедуры вычисления сечения дефектообразования  $\sigma(E)$ , когда варьируемой величиной выступит не константа  $\alpha$ , а функция  $\alpha(T)$ . Учитывая приведенную выше оценку и работоспособность теории при  $\alpha(T) = \text{const}$  [9,10], ясно, что функция  $\alpha(T)$  должна быть убывающей и иметь асимптоту снизу при  $T \gg T_d$ . Такими свойствами обладает выбранная нами функция

$$\alpha(T) = (A - B) \exp[-C(T - T_f)] + B, \quad (4)$$

где  $A, B, C$  — свободные параметры, причем  $\alpha \rightarrow B$  при  $T \rightarrow \infty$ ,  $\alpha = A$  при  $T = T_f$ . При этом заранее можно предположить, что интервал значений для варьирования параметра  $A$  расположен в окрестности точки  $A = 0.33$ , а параметр  $B$  — в окрестности точки  $B = 0.2$ .

Первично выбитый атом, имеющий начальную избыточную кинетическую энергию  $T$  в результате последовательности соударений уменьшает ее до  $T_1 = [1 - \alpha(T)]T$ ,  $T_2 = [1 - \alpha(T_1)]T_1$ , ... вплоть до значения  $T_N = [1 - \alpha(T_{N-1})]T_{N-1}$ , при котором дальнейшие скачки невозможны, т.е.  $T_N > T_f \geq T_{N+1}$ . Эта последовательность соударений в соответствии с изложенным выше определяет расстояние, на

которое удалится атом в результате скачков  $N$  от начального положения в узле решетки кристалла, т.е. определяет вероятность  $W(T)$ . Атом, получивший при первом соударении с первично выбитым атомом энергию  $\alpha(T)T$ , приобретает избыточную кинетическую энергию  $\alpha(T)T - \tau$ . Далее по аналогичной схеме он разменивает ее в дальнейших атом-атомных соударениях до значения  $T_f$  и при этом с вероятностью  $W[\alpha(T)T - \tau]$  также может образовывать дефект. Нетрудно подсчитать, что суммарное сечение образования дефектов, включающее возможное образование дефекта всеми атомами, участвующими в последовательных соударениях, т.е. сечение радиационного дефектообразования, с учетом размножения определяется следующим выражением:

$$\sigma(E) = \int_{T_f}^{T_m - \tau} \left\{ W(T) + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{L=2^{i-1}} W(T_{i,j}) \right\} d\sigma(E, T + \tau), \quad (5)$$

где множество  $\{T_{i,j}\}$  представляет собой множество значений энергий быстрых атомов, генерированных в результате каскада атом-атомных столкновений, начатых первично генерированным атомом с энергией  $T$ ;  $d\sigma(E, T + \tau)$  — резерфордское (с учетом релятивистских поправок [13]) сечение упругого рассеяния электрона с энергией  $E$  на атоме при передаче ему энергии  $T + \tau$ ;  $T_m = 4mE/M$  — максимальная энергия, которая может быть передана атому массы  $M$  атакующим электроном массы  $m$ , с энергией  $E$ . Значение энергии  $\tau$  особенно существенно отражается на вычислении сечения образования дефектов при передаче атому кристалла с относительно малой энергией  $T$ , поэтому здесь учет этого обстоятельства предствляется актуальным. Заметим, что учет размножения дефектов [формула (5)] использует более реалистическое выражение для вероятности образования разделенной пары Френкеля  $W(T)$  (2), чем ступенчатое распределение (1), на котором фактически основаны все известные [4,5,8,10,14] методики вычисления скорости введения радиационных дефектов в кристалл.

Таким образом, с учетом размножения дефектов выражение (5) представляет собой плавную функцию от энергии  $E$  дефектообразующей частицы при заданных параметрах  $P$ ,  $\alpha(T)$ ,  $T_f$ ,  $\tau$ , характеризующих кристалл:  $\sigma(E) \equiv \sigma_{P, \alpha(T), T_f, \tau}(E)$ . Зависимости  $W(T)$  и  $\sigma(E)$  весьма чувствительны к выбору параметров, поэтому по экспериментальным кривым  $\sigma(E)$  можно подобрать наиболее подходящие значения параметров, приводящие к совпадению теории и эксперимента.

Величина  $T_f$  близка по физическому смыслу к энергии миграции межузельного атома, а величина  $\tau$  — к энергии образования вакансии. Хотя сведения об энергии миграции межузельного атома и энергии образования вакансии носят противоречивый характер [15], однако порядок этих величин не вызывает сомнений. Так, значения энергии миграции межузельного атома для кристаллов Si и Ge лежат в области десятых долей эВ, а энергии образования вакансий — в области единиц эВ. В связи с этим при проведении конкретных расчетов для кристаллов Si и Ge были выбраны следующие области изменения этих параметров:  $0.1 < T_f < 1.0$  эВ,  $1 < \tau < 10$  эВ. Расчеты реализованы на ЭВМ типа IBM PC/AT-486.

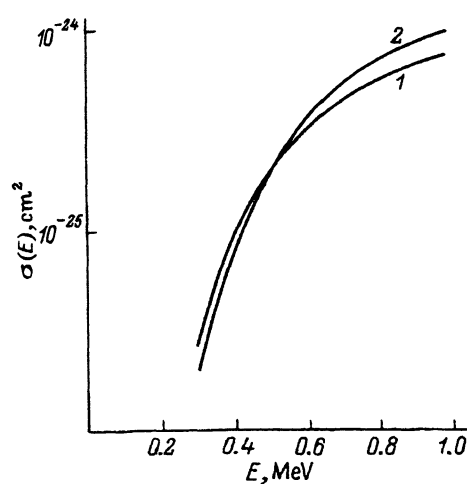


Рис. 1. Сечение образования дефектов Френкеля при прохождении электронов с энергией  $E$  кристалла Si: 1 — вычисленная при  $P = 8$ ,  $T_f = 0.25$  эВ,  $\tau = 5.5$  эВ и  $\alpha(T)$  (см. рис. 3); 2 — усредненная по экспериментальным значениям из работы [16].

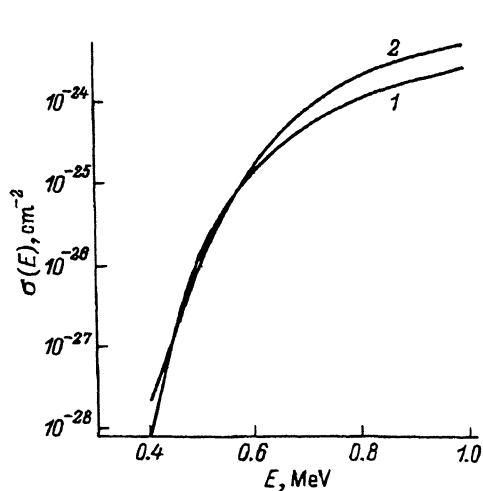


Рис. 2. Сечение образования дефектов при прохождении электронов с энергией  $E$  кристалла Ge: 1 — расчет при  $P = 8$ ,  $T_f = 0.3$  эВ,  $\tau = 4$  эВ и  $\alpha(T)$  (см. рис. 3); 2 — усреднение по экспериментальным значениям из работы [17].

Подбор наиболее подходящих теоретических значений параметров  $P$ ,  $\alpha(T)$ ,  $T_f$ ,  $\tau$  для случаев облучения быстрыми электронами кристаллов Si и Ge приводит, как видно из рис. 1, 2, к совпадению настоящей теории и экспериментов [16,17] в рамках точности эксперимента. Сечения образования дефектов  $\sigma(E)$ , полученные экспериментально, представлены на рис. 1, 2 в виде усредненных плавных кривых. При этом наилучшая точность усреднения для случая Si составила 40% величины, для случая Ge — 70% величины. Теоретические кривые для  $\sigma(E)$ , наиболее близкие к экспериментальным, получены при следующих параметрах для Si:  $P = 8$ ,  $T_f = 0.25$  эВ,  $\tau = 5.5$  эВ; для Ge:  $P = 8$ ,  $T_f = 0.3$  эВ,  $\tau = 4$  эВ и при одной функции  $\alpha(T)$ , представленной на рис. 3. Следует отметить, что семейства кривых  $\sigma(E)$ , совпадающих на рассмотренном интервале энергий  $E$  с экспериментальными кривыми с точностью не хуже 25% величины для Si и 70% для Ge, определяют только одну функцию  $\alpha(T)$  (рис. 3) и дают точность параметров для Si:  $P = 8$ ,  $T_f = (0.27 \pm 0.02)$  эВ,  $\tau = (5.3 \pm 0.2)$  эВ; для Ge:  $P = 8$ ,  $T_f = (0.3 \pm 0.05)$  эВ,  $\tau = (4.0 \pm 0.2)$  эВ. Такой результат свидетельствует о достаточной устойчивости процедуры восстановления параметров  $P$ ,  $T_f$ ,  $\tau$  и функции  $\alpha(T)$ , определяющих зависимость  $W(T)$  для идеального кристалла (рис. 4), которую, поддерживая предложение авторов работы [6], будем также называть функцией В.Л. Винецкого. Как видно из рис. 4, плавный ход функции Винецкого не изменился, а ее величина уменьшилась по сравнению с таковой, полученной в [9] без учета размножения дефектов и дополнительной энергии  $\tau$ . Более того, оказалось (рис. 3, 4), что в рамках точности модели и базового эксперимента [16,17] в идеальных кристаллах Si и Ge дефектообразование описывается одной функцией  $\alpha(T)$  и одной функцией Винецкого  $W(T)$ . Это, возможно, указывает на общий характер радиационного дефектообразования в идеальных кристаллах различной природы.

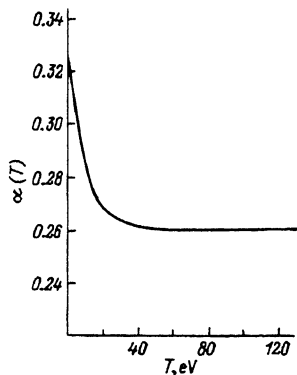


Рис. 3. Средняя доля передаваемой энергии в атом-атомных соударениях  $\alpha(T) = (A - B) \exp[-C(T - T_f)] + B$ , где  $A = 0.33$ ,  $B = 0.26$ ,  $C = 0.1$ .

Недавно в работе [12] для реального и практически идеального кристалла Si экспериментально восстановлена функция вероятности  $W(T)$ . Несмотря на то что при ее восстановлении по экспериментальным данным не учитывалось ни размножение дефектов при атом-атомных соударениях, ни дополнительная энергия  $\tau$ , тем не менее плавный ход экспериментальных зависимостей повторяет ход функции Винецкого, подтверждая тем самым принципиальный вывод работы [9] и настоящей о необходимости отказа от ступенчатого распределения (1).

В заключение заметим, что уточнение диффузионной модели радиационного образования разделенных пар Френкеля в идеальном кристалле, состоящее в более реалистическом, чем в работах [9,10], рассмотрении выбивания атома из узла кристаллической решетки в междоузлие и его дальнейшего скачкообразного блуждания по кристаллу с деградацией избыточной кинетической энергии в атом-атомных соударениях, обеспечило объяснение экспериментальных зависимостей  $\sigma(E)$  и позволило для кристаллов Si и Ge уточнить функцию Винецкого  $W(T)$ , а также оценить ряд характерных параметров теории  $P$ ,  $T_f$ ,  $\alpha(T)$ ,  $\tau$ , имеющих самостоятельное значение.

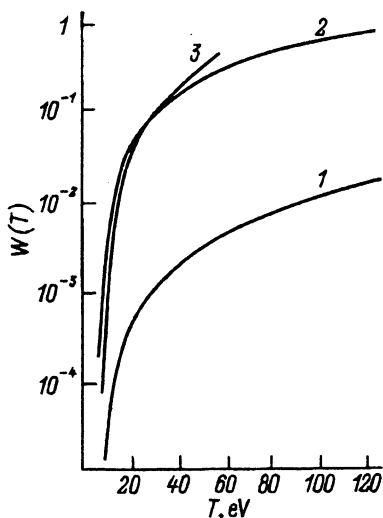


Рис. 4. Зависимость вероятности образования разделенных пар Френкеля от избыточной кинетической энергии выбитого атома в идеальных кристаллах (функции Винецкого) Si и Ge (1); функция Винецкого, вычисленная [9,10] без учета размножения дефектов и дополнительной энергии  $\tau$  для Si (2) и Ge (3).

## Список литературы

- [1] F. Seitz. Disc. Farad. Soc., N 5, 271 (1949).
- [2] A.E. Fein. Phys. Rev., **109**, 1076 (1958).
- [3] В.В. Галаванов. ФТТ, **1**, 432 (1959).
- [4] Г.Н. Кинчин, Р.С. Пиз. УФН, **60**, 590 (1956).
- [5] В.С. Вавилов. *Действие излучений на полупроводники* (М., 1963).
- [6] Н.А. Витовский, Д. Мустафакулов, А.П. Чекмарева. ФТП, **11**, 1747 (1977).
- [7] В.Л. Винецкий, Г.А. Холодарь. *Радиационная физика полупроводников* (Киев, 1979).
- [8] К. Лейман. *Взаимодействие излучения с твердым телом и образование элементарных дефектов* (М., 1979).
- [9] В.Л. Винецкий, И.Р. Ентинзон, Г.А. Холодарь. ФТП, **13**, 912 (1979).
- [10] V.L. Vinetskii, I.R. Entinzon, G.A. Kholodar. Phys. St. Sol. (a), **67**, 477 (1981).
- [11] Ю.И. Визгин, Н.А. Иванов, В.И. Остроумов, А.И. Труфанов. ФТП, **14**, 554 (1980).
- [12] Л.С. Берман, Н.А. Витовский, В.И. Ломасов, В.Н. Ткаченко. ФТП, **24**, 1816 (1990).
- [13] W.A. McKinley, H. Feshbach. Phys. Rev., **74**, 1759 (1948).
- [14] И.А. Ахиезер, А.Э. Гинзбург. Укр. физ. журн., **22**, 1233 (1977).
- [15] С. Ху. В кн.: *Атомная диффузия в полупроводниках*, под ред. Д. Шоу (М., 1975) с. 248.
- [16] J.W. Haddad, P.C. Banbury. Phyl. Mag., **14**, 829 (1966).
- [17] W. Brown, W. Augustiniak. J. Appl. Phys., **30**, 1300 (1959).

Редактор В.В. Чалдышев

---