

## К РАСЧЕТУ ПОРОГОВОЙ ФУНКЦИИ СМЕЩЕНИЯ АТОМОВ В КРИСТАЛЛАХ

*К.В.Потатий, Ю.А.Зайкин*

Для расчета концентрации точечных дефектов, возникающих в твердом теле при его облучении высокоэнергетическими частицами на первичной стадии дефектообразования, необходимо знать пороговую функцию смещения  $P_d(E_2)$ , где  $E_2$  — кинетическая энергия, сообщаемая атому бомбардирующей частицей. Традиционно используемая пороговая функция в виде ступеньки приводит к завышению на порядок расчетной концентрации дефектов по сравнению с экспериментальной [1–4]. Для устранения этого расхождения в ряде работ [2,4–7] использовались пороговые функции, отличные от ступенчатой. Наиболее удачной работой в этом плане являются работы [4–5]. Используя модель соударений твердых шаров и рассматривая движения первично выбитых атомов (ПВА) как диффузию с равновероятным распределением направлений последовательных скачков, авторы [4,5] рассчитали пороговую функцию и соответствующее сечение дефектообразования для электронного облучения. Рассчитанные сечения хорошо согласуются с экспериментальными для Si и Ge в интервале энергий электронов  $E_1 = 0.2–1$  МэВ при определенном наборе модельных параметров. Одним из таких параметров является радиус спонтанной рекомбинации дефекта Френкеля  $R_D$ . Указанное выше совпадение наблюдалось при  $R_D \simeq 50 \text{ \AA}$  [4]. Однако аналитические расчеты [8] и расчеты с использованием методов машинного моделирования [9] дают величину  $R_D \simeq 5–10 \text{ \AA}$  для Si и Ge. Такое большое значение  $R_D$  связано с тем, что в работе [4] используются наряду с другими допущениями и такие не вполне обоснованные, как постоянство длины свободного пробега  $\lambda$  атома от одного столкновения до другого столкновения и постоянство доли передаваемой энергии атомам при каждом соударении.

В настоящей работе с учетом зависимости от энергии атома  $E_2$  длины свободного пробега  $\lambda(E_2)$  и доли передаваемой энергии  $\alpha(E_2)$  при каждом соударении развивается “диффузионный” подход Винецкого для расчета  $P_d(E_2)$ . В работе [4] вероятность образования пары Френкеля равна вероятности выхода атома за пределы сферы радиуса  $R_D$  при его блуждании по кристаллу после получения избыточной энергии  $E_2$  от налетающей частицы. В рамках такого диффузионного подхода пороговая функция определяется выражением

$$P_d(E_2) = 1 - \frac{2}{\pi} \int_0^P y \left\{ \sin(yx) \left( \frac{\sin x}{x} \right)^N x dx \right\} dy, \quad (1)$$

где  $P = R_D/\lambda(E_2)$ ,  $N(E_2)$  — число скачков атомов до полной остановки.

Длина свободного пробега  $\lambda$  рассчитывалась с использованием сечения Линдхарда–Нильсена–Шарффа для обратнокубического потен-

Значения параметров  $E_f^i$ ,  $R_D$ ,  $C$  для Ge, использованных при расчетах  $E_{2\min}$ ,  $P_d(E_2)$  и  $G_d(E_1)$

$E_f^i$ , эВ	$R_D$ , Å	$C$ , эВ <sup>2</sup>	$E_{2\min}$ , эВ	$E_f^i$ , эВ	$R_D$ , Å	$C$ , эВ <sup>2</sup>	$E_{2\min}$ , эВ	
3.0	4.25	0.3	10.0	3.5	7.25	4.5	9.5	
			10.25		7.5	5.0	9.5	
	4.5	0.45	10.25		5.0	0.8	10.0	
			10.5		5.0	0.9	11.0	
			10.75		5.5	1.5	11.0	
			10.25		6.0	2.0	10.0	
	4.75	0.6	10.5		4.0	6.5	3.0	10.0
			10.75			4.0	0.2	9.0
			9.75			4.0	0.3	12.0
	5.0	0.75	10.0			4.5	0.5	10.0
			10.25			4.5	0.5	11.0
			10.5			4.75	0.5	9.0
			10.25			4.75	0.75	11.0
	5.25	1.0	10.5			4.75	0.75	12.0
10.0			5.0	0.8		10.0		
3.0	5.75	1.5	10.0	5.5		1.4	10.0	
	6.0	2.0	10.0	6.0		2.2	10.0	
	6.25	2.5	10.5					
	6.5	3.0	10.5					
	6.75	3.5	10.0					
	7.0	4.0	10.0					

циала межатомного взаимодействия, применимого для рассматриваемых энергий атомов  $E_2 \leq 200 \rightarrow B$  [10],

$$\lambda(E_2) \simeq \frac{25.95 \cdot E_2^{2/3} \cdot T_{\min}^{1/3} \cdot 10^{22}}{n_0 \cdot z^{8/9} (E_2^{1/3} - T_{\min}^{1/3})}, \text{ Å}, \quad (2)$$

$z$  — порядковый номер элемента,  $n_0$  — концентрация атомов. Здесь  $T_{\min}$  — минимальная энергия, передаваемая окружающим атомам от атома с энергией  $E_2$  при одном столкновении. Минимально передаваемая энергия не может равняться нулю, поскольку максимальное прицельное расстояние атом-атомного взаимодействия не может превышать половины постоянной решетки кристалла. В малоугловом приближении можно получить для  $T_{\min}$  следующее:

$$T_{\min} \simeq c/E_2. \quad (3)$$

Коэффициент  $C$  зависит от температуры облучения, межатомного потенциала и кристаллографии. Наши оценки  $C$  показали, что  $10^{-2} \lesssim C \lesssim 10$ . Число скачков атома  $N(E_2)$  определялось из обычного выражения упругих потерь энергии ПВА на единицу пути. Используя обратнокубический потенциал, получили

$$N(E_2) = \frac{3(E_2^{2/3} - E_f^{2/3})}{C^{1/3}} - 3 \cdot \ln \left( \frac{E_2^{2/3} + C^{1/3}}{E_f^{2/3} + C^{1/3}} \right). \quad (4)$$

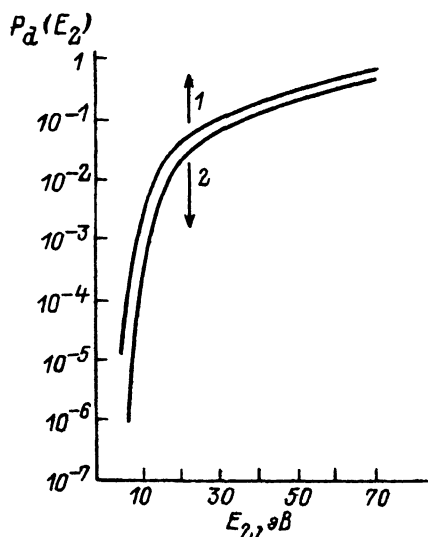
При этом мы допускали, что движение атома прекращается, когда его энергия становится равной некоторой энергии  $E_f$ . В наших расчетах полагалось, что  $E_f = E_f^i$ , где  $E_f^i$  — энергия образования междоузельного атома.

Сечения образования пар Френкеля  $G_d(E_1)$  рассчитывались для Si и Ge в случае электронного облучения в интервале их энергий  $E_1 = 0.2-1$  МэВ. При этом для  $G_d(E_1)$  использовалось обычное выражение

$$G_d(E_1) = \int_{E_{2\min}}^{E_{2\max}(E_1)} P_d(E_2) \frac{dG(E_1, E_2)}{dE_2} dE_2, \quad (5)$$

которое справедливо в случае тонких фольг и тогда, когда отсутствует атом-атомный каскад. В интеграле (5)  $E_{2\min}$  — минимальная энергия атома, при которой  $P_d(E_2)$  равна нулю. Действительно, если допустить [11], что  $E_{2\min}$  такая энергия, при которой движущийся атом не отклоняется от своего первоначального направления, то этой энергии будет соответствовать минимально возможное число скачков  $R_D/\lambda(E_2)$ , так что  $N(E_{2\min}) = R_D/\lambda(E_{2\min})$ . В результате для определения  $E_{2\min}$  приходим к уравнению

$$E_{2\min}^{2/3} + \frac{C^{1/3}}{2} \cdot \ln \left( \frac{E_{2\min}^{2/3} - C^{1/3}}{E_{2\min}^{2/3} + C^{1/3}} \right) = E_f^{2/3} + \frac{R_D \cdot n_0 \cdot Z^{8/9}}{77.86} - \frac{C^{1/3}}{2} \ln \left( \frac{E_f^{2/3} + C^{1/3}}{E_f^{2/3} - C^{1/3}} \right). \quad (6)$$



Пороговая функция смещения атомов для германия.

1 — результаты расчетов работы [5], 2 — наш расчет при значениях  $E_f^i = 4$  эВ,  $R_D = 4.75$  Å.

Из (6), зная  $R_D$ ,  $C$ ,  $E_f^i$ , можно определить  $E_{2\min}$ . Таким образом, единственным параметром в такой модели остается параметр  $C$ , входящий в определение  $T_{\min}$ . Вернее сказать, для определения  $\lambda(E_2)$ ,  $N(E_2)$  и  $E_{2\min}$  необходимо знать потенциал межатомного взаимодействия при условии, что  $R_D$ ,  $E_f^i$  известны и их значения достаточно надежны.

В таблице приведены результаты расчетов энергии  $E_{2\min}$  для Ge при различных значениях  $R_D$ ,  $E_f^i$  и  $C$ . Как видно, при варьировании этих величин в разумных пределах, соответствующих литературным данным [6,8,9], значение  $E_{2\min} \approx 10$  эВ. Сечения  $G_d(E_1)$  сравнивались с аналогичными, вычисленными в работе [4], для которых наблюдалось согласие с экспериментальными результатами [1]. Для всех значений  $R_D$ ,  $E_f^i$ ,  $C$  и  $E_{2\min}$ , приведенных в таблице, абсолютное различие между  $G_d^{\text{рас}}(E_1)$  и  $G_d^{\text{эк}}(E_1)$  не превышают 10%. Как показывают вычисления и анализ, наиболее существенно меняются  $G_d(E_1)$  при варьировании параметра  $C$ . Как видно из рисунка, рассчитанная нами пороговая функция для Ge достаточно хорошо согласуется с полученной в работе [5] при разумных значениях  $R_D$  и  $E_f^i$ .

Дальнейшее развитие модели и повышение точности расчетов пороговой функции связано с применением более точных сечений электрон-атомных (сечение Мотта) и атом-атомных взаимодействий, а также с учетом влияния температуры на пороговую функцию и сечение образования точечных дефектов при относительно низких температурах, когда вакансии можно считать неподвижными.

#### Список литературы

- [1] Вавилов В.С., Смирнов Л.С., Спицын А.В. и др. // ЖТФ. 1958. Т. 38. Вып. 5. С. 960-961.
- [2] Zucasson P.G., Walker R.M. // Disc. of the Faraday Soc. 1961. Vol. 31. P. 57-66.
- [3] Витовский Н.А., Мустафакулов Д., Чекмарева А.П. // ФТП. 1977. Т. 11. Вып. 9. С. 1747-1753.
- [4] Винецкий В.Л., Ентинзон И.Р., Холодарь Г.А. // ФТП. 1979. Т. 13. Вып. 5. С. 912-916.
- [5] Винецкий В.Л., Ентинзон И.Р., Холодарь Г.А. // ФТП. 1980. Т. 22. Вып. 3. С. 709-714.
- [6] Вавилов В.С., Кив А.Е., Ниязова О.Р. Механизмы образования и миграции дефектов в полупроводниках. М.: Наука, 1981. 368 с.
- [7] Томпсон Н.В. Дефекты и радиационные повреждения в металлах М.: Мир, 1971. 367 с.
- [8] Кошкин В.М., Забродский Ю.Р., Подорожанская Н.М. // ВАНТ. Сер. Физика радиационных повреждений и радиац. материаловед. ХФТИ. 1979. Вып. 3 (11). С. 21-26.
- [9] Климович Б.В. Автореф. канд. дис. Минск, 1990. 19 с.
- [10] Готт Ю.В. Взаимодействие частиц с веществом в плазменном исследовании. М.: Атомиздат, 1978. 272 с.
- [11] Ентинзон И.Р., Холодарь Г.А. Моделирование на ЭВМ кинетики дефектов в кристаллах. Л., 1985. С. 126-137.

Казахский университет  
Алма-Ата

Поступило в Редакцию  
24 июня 1993 г.