

для гетеропереходов «эффект окна» [7]. Преобладание фоточувствительности в области собственного поглощения веществом слоя обусловлено тем, что активная область ГП лежит большей частью в широкозонном слое.

При освещении со стороны подложки p -ZnSnAs₂ фоточувствительность в области $\hbar\omega > 0.7$ эВ (300 К) практически не проявилась, что связано с удалением области фотогенерации от активной области ГП на расстояние, превышающее длину диффузационного смещения фотоэлектронов в кристалле подложки.

Таким образом, экспериментально доказана возможность создания на кристаллах p -ZnSnAs₂ фоточувствительных структур, которые могут использоваться в качестве широкополосных фотопреобразователей естественного излучения. Для применения ZnSnAs₂ в поляриметрических фотодетекторах [3] еще предстоит решить проблему получения монодоменных кристаллов.

Литература

- [1] Прочухан В. Д., Рудь Ю. В. ФТП, 1978, т. 12, № 2, с. 209—213.
- [2] Брудный В. Н. Изв. вузов. Физика, 1986, № 8, с. 84—97.
- [3] Рудь Ю. В. Изв. вузов. Физика, 1986, № 8, с. 68—83.
- [4] Мехтиев Р. Ф., Османов Э-О, Рудь Ю. В. ПТЭ, 1964, № 2, с. 179—180.
- [5] Вайполн А. А., Кесаманлы Ф. П., Рудь Ю. В. Изв. АН СССР. ЖНМ, 1967, т. 3, № 6, с. 974—980.
- [6] Рудь Ю. В., Сергинов М., Скорюкун В. Е. ФТП, 1983, т. 17, № 7, с. 1264—1269.
- [7] Милис А., Фойхт Д. Гетеропереходы и переходы металл—полупроводник. М.: Мир, 1975, с. 430.
- [8] Рудь Ю. В., Соболев В. В., Шестацкий С. И. ФТП, 1968, т. 2, № 6, с. 745—746.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
6 июля 1987 г.

УДК 539.184.56

Журнал технической физики, т. 58, № 8, 1988

ВЛИЯНИЕ МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ НА УГЛОВОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ И СПИНОВУЮ ПОЛЯРИЗАЦИЮ ОЖЕ-ЭЛЕКТРОНОВ В АТОМАХ КРИПТОНА И КСЕНОНА

М. Я. Амусья, Н. М. Кабачник, И. С. Ли,
О. В. Ли, И. П. Сажина

Недавно [1, 2] проведены вычисления параметров угловой анизотропии оже-электронов, испускаемых при столкновении пучка неполяризованных частиц с атомами благородных газов. Оказалось, что теоретические значения, найденные в рамках одночастичных приближений, отличаются от экспериментальных [3] не только по абсолютной величине, но и по знаку. Одной из причин расхождения теории и эксперимента может являться то, что в расчетах не учитывались многоэлектронные эффекты, которые играют важную роль в ряде физических процессов в атомах [4], в том числе и в оже-распадах [5].

В настоящей работе впервые изучается влияние электронных корреляций (в рамках многочастичной теории возмущений) на угловое распределение и спиновую поляризацию оже-электронов.

Угловое распределение и спиновая поляризация оже-электронов определяются параметрами α_2 и ξ_2 , которые зависят от матричных элементов оже-распада [6]. Используя приближение L -связи для описания иона в конечном состоянии и пренебрегая спин-орбитальным взаимодействием для оже-электрона, можно записать соответствующие выражения для параметров α_2 и ξ_2 [6]

$$\alpha_2 = \sum_{l \leq l'} \alpha_{ll'} \operatorname{Re}(M_l M_{l'}^*) / \left| \sum_l b_l |M_l|^2 \right|,$$

$$\xi_2 = \sum_{l < l'} c_{ll'} \operatorname{Im}(M_l M_{l'}^*) / \left| \sum_l b_l |M_l|^2 \right|, \quad (1)$$

где M_l — амплитуды испускания электронов с орбитальными моментами l ; коэффициенты a_{ll}, c_{ll}, b_l зависят только от моментов начального и конечного состояний и могут быть вычислены аналогично [8].

В рассматриваемых нами переходах

1. $M_{45}N_1N_{23}(^3P_J)$ (Кr),
2. $N_{45}O_1O_{23}(^3P_J)$ (Xe),
3. $M_{45}N_{45}N_{45}(^3F_J)$ (Xe)

возможно излучение электронов с орбитальными моментами 1 и 3 (1 и 2 переходы) и 2,4 (3 переход), т. е. каждая из вакансий имеет два канала оже-распада. В этом случае выражения для α_2 и ξ_2 принимают вид

$$\begin{aligned}\alpha_2 &= A (a_{ll} |M_l|^2 + a_{l'l'} |M_{l'}|^2 + a_{ll'} |M_l| |M_{l'}| \cos \Delta), \\ \xi_2 &= A c_{ll'} |M_l| |M_{l'}| \sin \Delta, \\ A &= (b_l |M_l|^2 + b_{l'} |M_{l'}|^2)^{-1}.\end{aligned}\quad (2)$$

Здесь амплитуды отдельных каналов представлены в виде

$$M_l = |M_l| \exp(i\delta_l). \quad (3)$$

Величина Δ в (2) равна разности фаз δ_l и $\delta_{l'}$.

При нахождении амплитуд M_l излучения оже-электронов использовалась многочастичная теория возмущений (МТВ) с применением диаграммной техники теории многих тел. В нулевом приближении, за которое выбрано приближение Хартри—Фока (ХФ), амплитуда оже-распада вакансии i в состояние $(f_1 f_2)^{-1} q_i$ определяется диаграммами рис. 1. В следующем порядке теории возмущений по межэлектронному взаимодействию возникает значительно большее количество диаграмм. Часть из них (фейнмановские графики) изображена на рис. 2. Соответствующие аналитические выражения после проведения суммирования по проекциям орбитальных и спиновых моментов довольно громоздки и потому здесь не приводятся. Помимо указанных графиков, в расчетах принимается во внимание определенная часть диаграмм высших порядков теории возмущений. Во-первых, одна группа диаграмм учитывается с помощью выбора волновых функций оже-электронов, определяемых в поле конечного двукратного иона. Другая группа диаграмм высших порядков может быть учтена с помощью замены волновых функций вакансий f_1 и f_2 на новые \tilde{f}_1 и \tilde{f}_2 соответственно. Функции \tilde{f}_1 , \tilde{f}_2 находятся в поле начальной дырки i . Результаты вычислений параметров α_2 и ξ_2 представлены в табл. 1, 2.

Рассмотрим сначала угловое распределение оже-электронов (табл. 1). В криптоне значение параметра α_2 для линий $M_4N_1N_{23}(^3P_2)$ и $M_5N_1N_{23}(^3P_1)$ во всех приближениях отрицательны. Экспериментальные значения положительны. Однако нетрудно показать, что в используемом здесь приближении LS -связи значения параметра α_2 всегда будут отрицательны

Таблица 1
Значения параметров угловой анизотропии оже-электронов

Атом	Переход	Теория				Эксперимент
		Герман—Скилман [1]	Лирак—Фок [2]	Хартри—Фок	МТВ	
Kr	$M_4N_1N_{23}(^3P_1)$	—0.82		—0.82	—0.92	
	$M_4N_1N_{23}(^3P_2)$	—0.81	—0.89	—0.82	—0.89	1.80 ± 1.04
	$M_5N_1N_{23}(^3P_1)$	—0.99	—0.69	—1.00	—1.03	1.74 ± 0.83
	$M_5N_1N_{23}(^3P_2)$	—0.57		—0.63	—0.85	
	$N_4O_1O_{23}(^3P_1)$	—0.79		—0.92	—0.88	
	$N_4O_1O_{23}(^3P_2)$	—0.79		—0.69	0.46	
Xe	$N_5O_1O_{23}(^3P_1)$	—0.99		—0.96	—0.72	
	$N_5O_1O_{23}(^3P_2)$	—0.57		—0.81	—0.62	
	$M_4N_{45}^2(^3F_2)$	0.61		0.55	0.54	
	$M_4N_{45}^2(^3F_3)$	0.49		0.42	0.40	
	$M_4N_{45}^2(^3F_4)$	—0.61		—0.82	—0.85	
	$M_5N_{45}^2(^3F_2)$	0.12		—0.02	—0.04	
	$M_5N_{45}^2(^3F_3)$	0.41		0.32	0.30	
	$M_5N_{45}^2(^3F_4)$	0.51	—0.15	0.42	0.41	0.43 ± 0.12

Таблица 2
Значения параметров спиновой поляризации оже-электронов

Атом	Переход	Теория				Эксперимент
		Герман—Скилман [1]	Дирак—Фок [2]	Хартри—Фок	МВТ	
Kr	$M_4 N_1 N_{23} ({}^3P_1)$	-0.15		0.01	0.15	
	$M_4 N_1 N_{23} ({}^3P_2)$	0.03	-0.01	0.00	-0.04	-0.19 ± 0.11
Xe	$M_5 N_1 N_{23} ({}^3P_1)$	-0.06	0.00	0.00	0.07	
	$M_5 N_1 N_{23} ({}^3P_2)$	0.07		0.00	-0.08	-0.10 ± 0.06
Xe	$N_4 O_1 O_{23} ({}^3P_1)$	0.01		0.25	-0.10	
	$N_4 O_1 O_{23} ({}^3P_2)$	0.00		-0.21	0.23	
Xe	$N_5 O_1 O_{23} ({}^3P_1)$	0.01		0.35	-0.27	
	$N_5 O_1 O_{23} ({}^3P_2)$	-0.01		-0.17	0.07	
Xe	$M_4 N_{45}^2 ({}^3F_2)$	-0.07		0.01	0.01	
	$M_4 N_{45}^2 ({}^3F_3)$	0.04		-0.01	-0.01	
Xe	$M_4 N_{45}^2 ({}^3F_4)$	0.17		-0.03	-0.03	
	$M_5 N_{45}^2 ({}^3F_2)$	-0.17		0.03	0.03	
Xe	$M_5 N_{45}^2 ({}^3F_3)$	-0.09		0.02	0.01	
	$M_5 N_{45}^2 ({}^3F_4)$	0.06	0.02	-0.01	-0.01	0.00

(независимо от модели, в которой вычисляются амплитуды), по крайней мере для линии $M_5 N_1 N_{23} ({}^3P_1)$. Действительно, α_2 является функцией двух переменных: $|M_1| / |M_1|$ и Δ . Область изменения такой функции может быть установлена. Для $M_5 N_1 N_{23} ({}^3P_1)$ перехода нижняя и верхняя границы равны соответственно -1.07 и -0.67, т. е. все значения α_2 вне зависимости от модели расчета оже-амплитуд должны быть отрицательны, что мы и наблюдаем в теоретических работах.

Если расхождение между теорией и экспериментом не связано с экспериментальной ошибкой, то это означает неприменимость приближения LS -связи для описания угловой анизотропии оже-электронов.

Влияние электронных корреляций на параметры угловой анизотропии $N_{45} O_1 O_{23} ({}^3P_J)$ линий в Xe невелико. Исключение составляет переход $N_4 O_1 O_{23} ({}^3P_2)$, для которого роль корреляций оказалась весьма важной. Многоэлектронные эффекты изменяют даже знак параметра α_2 , т. е. приводят к качественному изменению углового распределения оже-электронов в этом распаде.

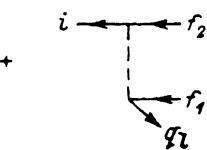


Рис. 1. Диаграммы, описывающие амплитуду оже-распада дырки i в приближении Хартри—Фока.

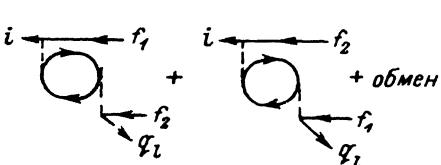


Рис. 2. Диаграммы второго порядка, учитывающие корреляционные поправки к амплитуде оже-распада.

Параметры спиновой поляризации ξ_2 более чувствительны к модели расчета оже-амплитуд, так как определяются только интерференционным членом (2). Из табл. 2 видно, что при переходе от одной модели к другой получаются разные (во многих случаях даже по знаку) значения параметра ξ_2 . Но, к сожалению, величина поляризации мала. Исключение составляет $N_4 O_1 O_{23} ({}^3P_2)$ линия в Xe, для которой в приближениях ХФ и МТВ получаются сравнительно большие величины поляризации. Причем учет электронных корреляций приводит к изменению знака параметра ξ_2 .

Литература

- [1] Кабачник Н. М., Сажина И. П. Опт. и спектр., 1986, т. 60, № 6, с. 1106—1108.
- [2] Blum K., Lohman B., Taute E. J. Phys. B, 1986, v. 19, p. 3815—3825.
- [3] Hahn U., Semke J., Merz H., Kessler J. J. Phys. B, 1985, v. 18, p. L417—L422.

[4] Амусья М. Я. Атомный фотоэффект. М.: Наука, 1987. 272с.

[5] Kelly H. Phys. Rev. A, 1975, v. 11, N 2, p. 556—565.

[6] Kabachnik N. M., Sazhina I. P. J. Phys. B, 1984, v. 17, N 7, p. 1335—1342.

Томский политехнический
институт им. С. М. Кирова

Поступило в Редакцию
6 июля 1987 г.

УДК 537.311.33

Журнал технической физики, т. 58, в. 8, 1988

ВЛИЯНИЕ НЕЙТРОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ НА СТРУКТУРНЫЕ ДЕФЕКТЫ В БЕСТИГЕЛЬНОМ КРЕМНИИ

И. М. Греськов, Н. Б. Гусева,
И. П. Никитина, Л. М. Сорокин

В данной работе исследовалось изменение микроструктуры бездислокационных монокристаллов кремния, выращенных зонной плавкой в вакууме, аргоне или смеси аргона с водородом при нейтронном облучении и последующей термообработке. Для исследования применялись методы селективного травления и рентгеновской дифракционной топографии по Лангу.

Облучение кремния проводилось в каналах реактора ВВР-Ц с плотностями потока тепловых нейтронов $2 \cdot 10^{12}$ и $5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ и соотношением тепловых и быстрых нейтронов, равным 20 : 1. Температура образцов при облучении была не более 60 °C, термообработка проводилась в интервале 600—1250 °C в кварцевых и кремниевых тиглях на воздухе или в хлорсодержащей атмосфере (ХСА), получаемой разложением CCl_4 в присутствии кислорода. Подобная обработка кремния используется для ядерного легирования, обеспечивающего высокую однородность по удельному сопротивлению [1].

Структурные дефекты изучали в пластинах толщиной 0.5—2.0 мм, вырезанных из внутренней части облученных и термообработанных кристаллов.

Обнаружено различие в структуре облученных и необлученных образцов после термообработки.

В исходных кристаллах, выращенных в среде аргона с водородом, рентгеновской топографией обнаружены крупные дефекты с размером дифракционного изображения до десятков микрон, которые, согласно [2], являются преципитатами водорода. При термообработке выше 600 °C даже в течение нескольких минут крупные водородные преципитаты генерируют ряды дислокационных петель в направлениях $\langle 110 \rangle$, образующие дислокационные розетки. Кроме того, появляются существенно меньшие дефекты размером в единицы микрон, также генерирующие ряды петель. Концентрация мелких дефектов не зависит от температуры отжига, но может сильно изменяться вдоль слитка, что указывает на их ростовое происхождение. Крупные дефекты формируются при росте кристалла за счет мелких, очищая большие области вокруг себя (рис. 1).

После аналогичной термообработки образцов, облученных нейтронами, мелкие дефекты с рядами дислокационных петель не обнаруживаются (вплоть до 1250 °C). Вокруг больших дефектов образуются дислокационные геликоиды. Вблизи поверхности кристаллов геликоиды усеяны крупными частицами примесных выделений (рис. 2).

Во всех зонных бездислокационных монокристаллах кремния (аргонный, аргон-водородный, вакуумный) образуются различные типы микродефектов, являющиеся скоплениями точечных дефектов [3]. Тип микродефектов зависит от условий роста кристалла. Если эти дефекты не обнаруживаются в ростовом кристалле, то они выявляются после термообработки. Обычно отжиг при температуре выше 1000 °C приводит к агломерации «замороженных» при росте в неравновесном состоянии избыточных точечных дефектов и их выявлению селективным травлением.

В случае предварительного облучения кристаллов в реакторе дефекты, имеющие спиральный характер распределения, выявляются после отжига при более низких температурах (от 750 °C). Они имеют несколько меньший размер, но большую (на полтора порядка) концентрацию в отличие от микродефектов, выявляемых без облучения.

В кристаллах, содержащих в исходном состоянии микродефекты, сразу после облучения обнаруживается селективным травлением уменьшение их размера и количества. Пострадав-