

при дозе  $5 \cdot 10^3$  Гр с достижением максимального значения поглощения в районе 260 нм оптического спектра, т. е. с образованием максимального количества ионов  $Fe^{3+}$  при ионизации  $Fe^{2+}$  [5]. Это ведет к увеличению кулоновского отталкивания между ионами в агрегате и способствует их распаду.

Отметим, что в кристаллах  $NH_4H_2PO_4$  и  $KH_2PO_4$  параметры аннигиляции с ростом дозы менялись аналогично.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Dalal N. S., Hebden J. A., McDowell C. A. // J. Chem. Phys. 1975. V. 62. N 11. P. 4404—4410.
- [2] Kirkegaard P., Eldrup M. // Comput. Phys. Comm. 1974. N 7. P. 401—409.
- [3] Арефьев К. П., Воробьев С. А., Прокопьев Е. П. Позитроника в радиационном материаловедении ионных структур и полупроводников. М., 1983. 88 с.
- [4] Gouzza L. V., Samraio J. F. // J. Phys. Soc. Jap. 1982. V. 51. N 2. P. 540—544.
- [5] Бредихин В. И., Киселева Н. В., Королихин В. В. // Изв. АН СССР, неорг. матер. 1986. Т. 22. № 1. С. 112—114.

Поступило в Редакцию  
10 мая 1988 г.

В окончательной редакции  
28 октября 1988 г.

УДК 537.311.38

Физика твердого тела, том 31, в. 3, 1989

Solid State Physics, vol. 31, № 3, 1989

## ЗАВИСИМОСТЬ ЭФФЕКТИВНОСТИ АННИГИЛЯЦИИ ГОМОГЕННЫХ ПАР ФРЕНКЕЛЯ В КРИСТАЛЛАХ ОТ ИНТЕНСИВНОСТИ ОБЛУЧЕНИЯ

*В. В. Мизнович, В. В. Емцев, Т. В. Машовец, Н. А. Витовский*

Компоненты пары Френкеля — вакансия  $V$  и межузельный атом  $I$ , — создаваемые в твердом теле при его облучении ядерными частицами или квантами, либо разделяются, либо аннигилируют, если оказываются в пределах радиуса захвата, обусловленного их упругим и кулоновским взаимодействиями. Разделившиеся «свободные»  $V$  и  $I$  могут мигрировать по кристаллу и, взаимодействуя с примесными атомами или дефектами других типов, образовывать более сложные вторичные дефекты. Последние чаще всего и определяют экспериментально регистрируемые изменения макроскопических параметров материала при облучении.

Оставшиеся в пределах радиуса взаимодействия  $V$  и  $I$  аннигилируют — либо спонтанно [ $I^{-4}$ ], либо в результате диффузии или дрейфа [ $I^{-4-7}$ ]. Размер «зоны неустойчивости», т. е. той области, из которой не могут выйти межузельные атомы, зависит от условий облучения (температуры и темпа генерации электронно-дырочных пар) и в свою очередь определяет долю разделившихся пар Френкеля, т. е. скорость образования экспериментально наблюдаемых дефектов.

Большой интерес представляет характер зависимости скорости дефектообразования от интенсивности облучения (само существование этой зависимости не является очевидным). В ряде случаев, однако, такая зависимость наблюдалась экспериментально [ $I^{-8-11}$ ]. Целью настоящей работы явилось выяснение причин существования и определение характера зависимости вероятности разделения пар Френкеля от интенсивности и температуры облучения при условии однородного распределения пар Френкеля в объеме кристалла и достаточно малой их концентрации, когда каждая пара может рассматриваться как изолированная.

Выберем случайным образом из ансамбля пар Френкеля одну пару — генетически связанные  $V$  и  $I$ . Пусть один из компонентов пары находится в зарядовом состоянии  $i$ , а другой — в  $j$ . Обозначим энергию взаимодействия пары через  $v_{ij}(r)$  ( $r$  — радиус-вектор, соединяющий  $V$  и  $I$ ). Среднестатистическая энергия взаимодействия между  $V$  и  $I$  равна

$$\varphi(r) = \sum f_{ij}(r) v_{ij}(r), \quad (1)$$

где  $f_{ij}(r)$  — вероятность того, что при нахождении межузельного атома в точке  $r$  ( $r=0$  соответствует местоположению вакансии)  $V$  находится в зарядовом состоянии  $i$ , а  $I$  — в  $j$ .

Разумно предположить, что условию аннигиляции удовлетворяет та область  $S$ , окружающая вакансию, где выполняется условие  $\varphi(r) \leq \psi \approx \approx kT$ . Считая для простоты, что вероятность аннигиляции вакансии и

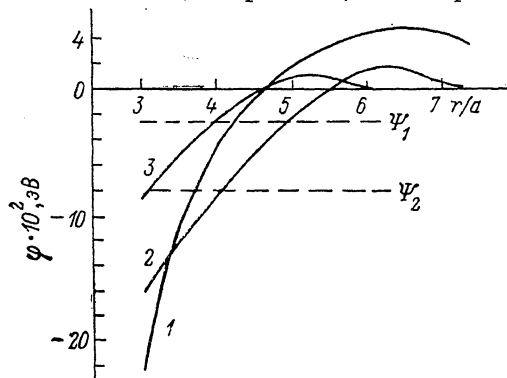


Рис. 1. Расчетная зависимость среднестатистической энергии взаимодействия  $\varphi(r)$  компонентов пары Френкеля от расстояния между ними  $r$  ( $\theta=55^\circ$ ,  $\alpha=45^\circ$ ) в  $n$ -кремнии ( $\rho=1$  Ом·см,  $T=300$  К) при различных уровнях инжекции  $\delta$ .

1 —  $10^{-2}$ , 2 — 1, 3 — 10. Штриховые прямые соответствуют значениям  $\psi_1 = -kT$ ,  $\psi_2 = -3 kT$ .

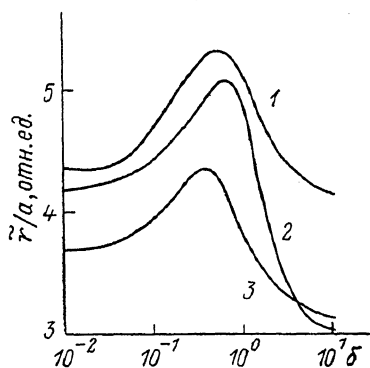


Рис. 2. Расчетная зависимость максимального расстояния  $r$  ( $\theta=55^\circ$ ,  $\alpha=45^\circ$ ) между компонентами пары Френкеля, при котором еще осуществляется аннигиляция ( $\varphi \leq \psi$ , при  $r \leq r$ ), от уровня инжекции  $\delta$  для  $n$ -кремния ( $\rho=1$  Ом·см,  $T=300$  К).  $\psi = -0.5 kT$  (1),  $-kT$  (2),  $-3 kT$  (3).

межузельного атома, попавшего в область  $S$ , равна единице, а в противном случае нулю, а также полагая функцию зарождения  $F(r)$  (вероятность нахождения межузельного атома в точке  $r$  после выхода атома из узла) модельной<sup>1</sup>

$$F(r) = \begin{cases} Q \neq 0, & r \leq R, \\ 0, & r > R, \end{cases} \quad (2)$$

получим выражение для нормированной на единицу доли проаннигилировавших пар  $\gamma$

$$\gamma = \frac{3}{4\pi} \frac{V_s}{R^3}. \quad (3)$$

В формулах (2), (3)  $R$  — максимальное расстояние, на которое разделяются  $V$  и  $I$  непосредственно в процессе рождения пары;<sup>2</sup>  $V_s$  — объем области, удовлетворяющей условию аннигиляции.

Поясним качественно зависимость  $\gamma$  от условий облучения, в данном случае от интенсивности  $J$ . С изменением  $J$  меняется концентрация неравновесных электронов и дырок. В результате меняются  $f_{ij}(r)$  [13], а следовательно, и  $\varphi(r)$  (1). Это приводит к изменению объема  $V_s$  области, удов-

<sup>1</sup> Эти приближения не скажутся на выводах.

<sup>2</sup> Численные значения  $R$  и  $Q$  для заданной энергии и массы бомбардирующих частиц могут быть получены на основе результатов, изложенных в [12].

детворяющей условию аннигиляции, а в результате — к изменению  $\gamma$  (следя соотношению (3)).

В количественных расчетах использовались выражения для  $f_{ij}(r)$  и  $v_{ij}(r)$ , полученные в работах [13, 14]. Здесь мы не приводим эти выражения в силу их громоздкости. Отметим лишь, что выражение для  $f_{ij}(r)$  получено методом, аналогичным методу определения стационарных неравновесных чисел заполнения изолированных дефектов, имеющих спектр зарядовых состояний. Выражение для  $v_{ij}(r)$  получено для полупроводников кубической симметрии с центром инверсии в приближении упругой анизотропной среды.

Учитывалась энергия кулоновского, упругого и поляризационного взаимодействий.<sup>3</sup>

На рис. 1 для иллюстрации представлена расчетная зависимость средне-статистической энергии взаимодействия  $\varphi(r)$  компонентов пары Френкеля от расстояния между ними ( $\theta, \kappa$  — полярный и азимутальный углы) на примере  $n$ -кремния. Области аннигиляции соответствуют такие  $r$ , для которых выполняется условие  $r \leq (r)_{\varphi=0} \equiv \tilde{r}$ .

На рис. 2 представлены расчетные зависимости  $\tilde{r}$  от уровня инжекции  $\delta$  для  $n$ -кремния. Качественно аналогичные зависимости наблюдаются и при других  $\theta$  и  $\kappa$ , когда выполняется условие аннигиляции. Поэтому  $V_S$ , а следовательно и  $\gamma$ , будет вести себя при изменении  $\delta$  качественно аналогично зависимости рис. 2.

Таким образом, результаты, полученные в настоящей работе, позволяют при разумных предположениях объяснить сложную немонотонную зависимость эффективности аннигиляции гомогенных пар Френкеля в кремнии от интенсивности облучения электронами [9] или гамма-квантами.

Авторы признательны М. И. Клингеру за полезную дискуссию.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Waite T. R. // Phys. Rev. 1957. V. 107. N 2. P. 463—470, 470—478.
- [2] Hyatt W. D., Koehler J. S. // Phys. Rev. 1971. V. B4. N 6. P. 1903—1910.
- [3] Копкин В. М., Забродский Ю. Р. // ФТТ. 1974. Т. 16. № 11. С. 3480—3483.
- [4] Крайчинский А. Н., Мпзрухин Л. В., Шаховцов В. И. // ФТП. 1983. Т. 17. № 3. С. 437—440.
- [5] Юрков Б. Я. // ФТТ. 1961. Т. 3. № 12. М. 3563—3570.
- [6] Винецкий В. Л., Яковец И. И. // ФТТ. 1972. Т. 14. № 10. С. 3046—3052.
- [7] Emtsev V. V., Mashovets T. V., Vitovskii N. A. // Phys. St. Sol. (a). 1985. V. 90. N 1. P. 523—530.
- [8] Абдусаттаров А. Г., Емцев В. В., Ломасов В. Н., Машовец Т. В. // ФТП. 1986. Т. 20. № 1. С. 164—167.
- [9] Lugakov P. F., Lukyanitsa V. V. // Phys. St. Sol. (a). 1984. V. 83. N 2. P. 521—528.
- [10] Золотухин А. А., Коваленко А. К., Мещерякова Т. М. и др. // ФТП. 1975. Т. 9. № 6. С. 1201—1202.
- [11] Крайчинский А. Н., Мпзрухин Л. В., Осташко Н. И., Шаховцов В. И. // ФТП. 1985. Т. 19. № 12. С. 2202—2204.
- [12] Винецкий В. Л., Ентинзон И. Р., Холодарь Г. А. // ФТП. 1979. Т. 13. № 5. С. 912—918.
- [13] Кожевников В. П., Михнович В. В. // ЖТФ. 1981. Т. 51. № 1. С. 153—156.
- [14] Артемьев В. А., Михнович В. В. // Деп. в «Электронике». М., 1987. № Р-4630.
- [15] Коган Ш. М. // ФТТ. 1963. Т. 5. № 10. С. 2829—2831.
- [16] Ивденбом В. Л., Логинов Е. Б., Осипов М. А. // Кристаллография. 1981. Т. 26. № 6. С. 1157—1162.

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

Поступило в Редакцию  
19 апреля 1988 г.  
В окончательной редакции  
3 ноября 1988 г.

<sup>3</sup> Вследствие неоднородной деформации, вводимой дефектами, возникает поляризация, пропорциональная градиенту деформации [15, 16] (флексозлектрический эффект).