

01;05;10

Флуктуационный механизм формирования прерывистых треков быстрыми ионами в кристаллах

© В.А. Белый, Ф.Ф. Комаров

Белорусский государственный университет,
220064 Минск, Белоруссия

(Поступило в Редакцию 26 марта 1997 г. В окончательной редакции 18 августа 1997 г.)

Рассмотрено влияние многократных потерь и захватов электронов на процесс формирования прерывистых треков от высокоэнергетических ионов в кристаллах. Предлагаемая модель флуктуации заряда позволяет количественно оценить продольные размеры дефектов в прерывистом треке, в то время как расширенная модель термического пика, учитывающая кулоновское расталкивание, дает разумные значения для поперечных размеров дефектов.

Введение

В настоящее время наиболее общепризнанной моделью формирования скрытых треков в кристаллах является модель термического пика. Согласно этой модели, теряемая высокоэнергетическим ионом энергия вызывает возбуждение электронной подсистемы кристалла, а затем посредством электрон-фононного взаимодействия энергия от возбужденных электронов передается атомам решетки и приводит к локальному плавлению мишени. Вследствие высокой скорости охлаждения расплавленная область не успевает эпитаксиально кристаллизоваться и застывает в аморфном либо мелкокристаллическом состоянии, образуя скрытый трек.

Целью данной работы является обобщение модели термопика для объяснения процесса формирования прерывистых треков. В предлагаемой модели критическим параметром формирования аморфной области считается величина неупругих потерь энергии, выделяемых пролетающим ионом на единицу пробега его в кристалле. Если эти потери превышают некоторое пороговое значение, то происходит разупорядочивание или даже плавление локальной области мишени и, как следствие, формирование трека. Таким образом, формирование прерывистого трека можно связать с колебаниями неупругих потерь энергии ионом, которые в свою очередь тесно связаны с колебаниями эффективного заряда иона [1].

Для сравнения предлагаемой модели с экспериментальными данными использовались результаты работы [2]. Согласно приведенным там данным, при облучении кристалла фосфида индия (InP) ионами ксенона (Xe) 250 MeV с флюенсом, равным $7 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, на глубине порядка 6–10 μm непрерывный трек от Xe становится прерывистым с длиной дефектов около 35 nm и таким же расстоянием между дефектами. При этом общая длина прерывистых треков составляет около 5 μm . Предложенная модель также сравнивалась с экспериментальными результатами формирования прерывистых треков в германии [3].

Сечения захвата и потери электрона ионом

В основу модели формирования прерывистых треков можно положить колебания эффективного заряда иона около некоторого среднего значения при его движении в мишени. Для определения среднего заряда можно воспользоваться полуэмпирической формулой для ионов с энергией выше 100 MeV, предложенной Дмитриевым и Николаевым [4],

$$q_0 = Z_i \left[1 + \left(\frac{1}{Z_i^\alpha} \frac{\nu}{\nu'} \right)^{-1/k} \right]^{-k}, \quad (1)$$

где Z_i — заряд ядра иона, ν — его скорость, $k = 0.6$, $\nu' = 3.6 \cdot 10^6 \text{ m/s}$, $\alpha = 0.48$.

При движении через мишень ион теряет свою энергию вследствие упругих и неупругих столкновений. Учитывая тот факт, что при рассмотрении высокоэнергетических ионов упругими потерями можно пренебречь, получается представленная на рис. 1 зависимость потерь энергии ионом Xe 250 MeV в фосфиде индия. Из этого рисунка видно, что потери энергии на глубине форми-

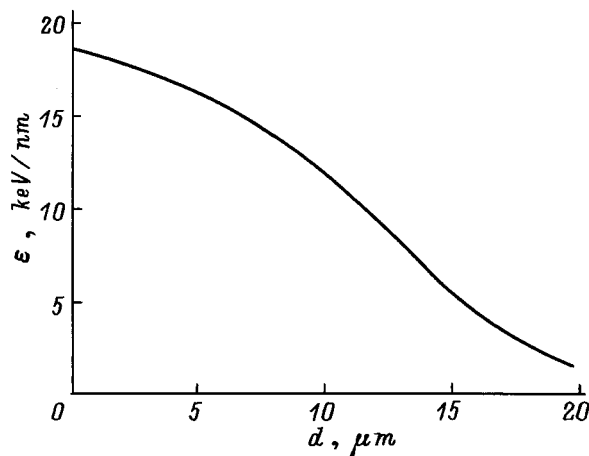


Рис. 1. Зависимость потерь энергии (ϵ) ионов Xe 250 MeV в InP от глубины (d).

рования прерывистого трека (около $10 \mu\text{m}$) составляют 12 keV/nm . При этом энергия иона оказывается равной 100 MeV , а его скорость $1.2 \cdot 10^9 \text{ m/s}$. Исходя из этого средний заряд Xe при формировании прерывистого трека составляет $q_0 \approx 24.7$.

Для определения среднего расстояния, на котором происходит флуктуация заряда иона, воспользуемся эффективными сечениями захвата/потери электрона ионом, движущимся в твердом теле. Было предложено несколько теоретических моделей для определения сечения захвата/потери электрона ионами, находящимися в равновесном (среднем) зарядовом состоянии. Ниже мы будем использовать формулу Бора для тяжелых ионов в тяжелых мишенях [4]

$$\sigma_0 \approx \pi a_0^2 (Z_i^{1/3} + Z_T^{1/3}) \left(\frac{\nu_0}{\nu} \right)^2, \quad (2)$$

где σ_0 — сечение захвата/потери электрона ионом, Z_i — заряд ядра иона, Z_T — заряд ядер атомов мишени, ν — скорость иона, $\nu_0 = 2.19 \cdot 10^6 \text{ m/s}$.

Для иона Xe в области формирования прерывистого трека эта формула дает значение $\sigma_0 = 1.8 \cdot 10^{-17} \text{ cm}^2$.

Флуктуации зарядового состояния иона и формирование прерывистых треков

Учитывая, что вероятность изменения заряда иона на отрезке пути x определяется выражением $P = N\sigma x$, где N — атомная плотность мишени, для среднестатистического пробега перезарядки можно записать

$$\lambda = \frac{1}{N\sigma}. \quad (3)$$

Используя полученные выше значения для σ , среднестатистический пробег перезарядки для иона Xe в InP получается равным $\lambda = 14 \text{ nm}$. Это значение несколько меньше экспериментально измеренного $\lambda \approx 35 \text{ nm}$ [2]. Указанное отклонение можно объяснить необходимостью более сильных колебаний потерь энергии ионом, т.е. необходимо учитывать процессы с захватом/потерей нескольких электронов. Так, относительные вероятности для процессов с многократным изменением заряда составляют приблизительно 60% для захвата/потери двух электронов, 40% для трех электронов и 20% для четырех электронов [4]. Процессы с более сильным изменением заряда маловероятны и ниже мы их учитывать не будем. Принимая во внимание вышесказанное, для длины дефекта в области прерывистого трека получается значение, в 2–3 раза большее рассчитанного по формуле (3) — $\lambda \approx 30\text{--}35 \text{ nm}$, что хорошо согласуется с экспериментальным значением [2]. Учитывая, что при таких колебаниях заряда иона его потери энергии могут меняться до 50% величины (вследствие квадратичной зависимости от заряда иона), длина прерывистого трека от иона Xe в фосфиде индия оказывается приблизительно равной $4\text{--}5 \mu\text{m}$ (рис. 1), что и наблюдалось в эксперименте [2].

Если предложенную модель применить к данным по бомбардировке германия ионами иода 150 MeV [3], то формула (3) приводит к значению $\lambda \approx 21 \text{ nm}$, что достаточно хорошо согласуется с экспериментом (15 nm), из чего можно предположить, что для формирования прерывистых треков ионами иода в германии достаточно процессов с потерей/захватом одного электрона.

Комбинированная модель формирования треков

На данный момент наиболее широко используемой моделью формирования треков является модель термопика. В этой модели предполагается, что теряемая при движении иона энергия вызывает локальное плавление мишени вблизи траектории иона, и если образовавшаяся расплавленная область быстро остынет, то она не успеет кристаллизироваться и вокруг траектории иона образуется аморфное или мелкодисперсное вещество, т.е. трек. Несмотря на качественное согласие с экспериментом, модель термопика имеет ряд недостатков. В частности, эта модель не учитывает образования неравновесного заряда вследствие разлета возбужденных электронов от траектории иона. Тем не менее потеря даже одного электрона на десять атомов приводит к дополнительной энергии кулоновского отталкивания $\sim 0.3 \text{ eV}$ на один атом, что сопоставимо с энергией, необходимой для плавления ($\approx 1 \text{ eV}$ в фосфиде индия).

Другим недостатком предлагаемых расчетов на основе модели термопика является пренебрежение энергией, необходимой для плавления вещества мишени (хотя эта энергия может в несколько раз превышать энергию, необходимую для нагрева до точки плавления). Удобнее всего эту энергию сразу ввести в эффективную температуру плавления, назвав ее полной температурой плавления. Так, для фосфида индия полная температура плавления будет составлять около 2500 K (против 1335 K для обычной температуры плавления).

Для определения нагрева мишени воспользуемся моделью, аналогичной предложенной в работе [5]. Так, предполагая, что потенциалы ионизации атомов совпадают с классическими уровнями энергии в модели Бора и сечение возбуждения электронов мишени подчиняется формуле Резерфорда [6], получаем в среднем 300 вырванных электронов на один нанометр пути иона со средней энергией 27 eV (при потерях 10 keV/nm) или 38 eV (при потерях 14 keV/nm). Разлетаясь от центра возбуждения, электроны взаимодействуют с продольными акустическими фононами и передают свою энергию решетке со скоростью [7]

$$\left| \frac{d\varepsilon}{dt} \right| = \frac{2^{3/2}}{\pi} \frac{C^2}{\hbar^4} \frac{m^{5/2}}{NM} \varepsilon^{3/2}, \quad (4)$$

где ε — энергия электрона, C — константа деформационного потенциала (полагалась равной 7.3 eV), m — масса электрона, M — средняя масса атомов мишени, N — атомная плотность мишени.

Проведя интегрирование этого выражения для плотности потерь энергии n возбужденными электронами, получаем

$$Q(t) = n \left| \frac{d\varepsilon}{dt} \right| = nA \left(\frac{A}{2}t + \varepsilon_0^{-1/2} \right)^{-3}, \quad (5)$$

$$A = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} \frac{C^2}{\hbar^4} \frac{m^{5/2}}{NM}. \quad (6)$$

Для вычисления разогрева мишени в цилиндрических координатах воспользуемся выражением [6]

$$T(r, t) = \frac{1}{4\pi K} \int_0^t \frac{Q(t')}{t-t'} \exp \left\{ -\frac{r^2}{4D(t-t')} \right\}, \quad (7)$$

где K и D — коэффициенты теплопроводности и температуропроводности мишени соответственно; n — число возбужденных электронов, вносящих вклад в локальный нагрев мишени (примерно половина от общего числа возбужденных электронов); ε_0 — средняя энергия этих электронов.

Расчет приводит к зависимостям, представленным на рис. 2 и 3. Из этих рисунков видно, что если пренебрегать неравновесным зарядом (полная температура плавления при этом составляет 2500 К), то даже при максимальных потерях энергии ионом радиус расплавленной области составляет менее двух нанометров (рис. 3) и, по всей видимости, не может приводить к образованию аморфной области. В то же время даже качественный учет кулоновского расталкивания атомов мишени, который был приведен выше, приводит к увеличению энергии атомов на 0.3 eV, что эквивалентно снижению полной температуры плавления на 30% (т.е. до 1700 К). Такое снижение полной температуры плавления приводит к тому, что в областях траектории иона, где потери энергии ионом составляют 10 keV/nm, радиус расплавленной области составляет 2 nm, т.е. трек не образуется, а в областях, где потери равны 14 keV/nm, расплавленная

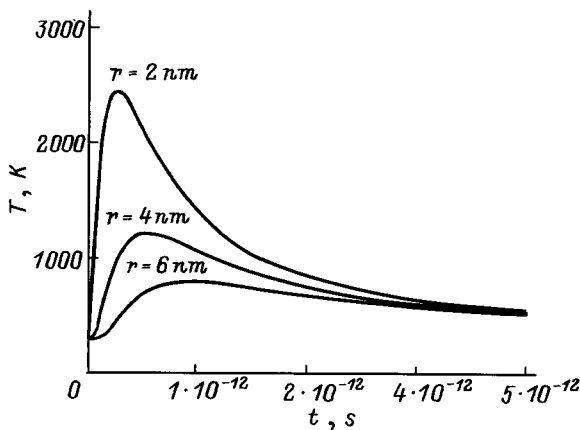


Рис. 2. Распределение температуры (T) вокруг траектории иона ксенона в фосфиде индия при потерях энергии (ε) 10 keV/nm.

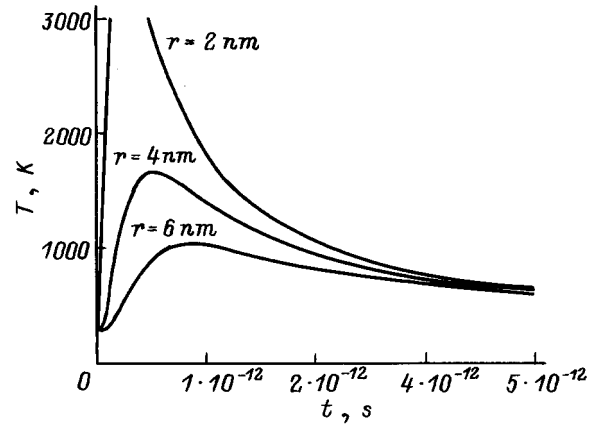


Рис. 3. Распределение температуры (T) вокруг траектории иона ксенона в фосфиде индия при потерях энергии (ε) 14 keV/nm.

область составляет около 4 nm, т.е. трек формируется. Таким образом, предложенная модель термопика позволяет объяснить процесс образования прерывистого трека и дает разумные величины для радиуса деформированной области [2]

Заключение

Предложенная в работе модель флуктуаций зарядового состояния иона позволяет качественно и количественно объяснить образование прерывистых треков при движении высокоэнергетических ионов в кристаллах. Приведенные расчеты показали, что для формирования прерывистых треков в некоторых кристаллах достаточно потери/захвата ионом одного электрона (ион иода в германии), в то время как в других кристаллах необходимы процессы с участием нескольких электронов (например, для иона ксенона в фосфиде индия).

Анализ модели термопика показал, что существенную роль на формирование трека оказывает неравновесный заряд, создаваемый пролетающим ионом. Полуколичественный учет этого заряда позволил определить поперечные размеры дефектов в прерывистом треке и получить значения, совпадающие с экспериментальными данными [2].

Данная работа была частично поддержана Международной соросовской программой образования в области точных наук.

Список литературы

- [1] Комаров Ф.Ф., Новиков А.П., Буренков А.Ф. Ионная имплантация. Минск: Изд-во университета, 1994. 303 с.
- [2] Gaiduk P.I., Komarov F.F., Wesch W. et al. // Phys. Rev. Lett. In press.
- [3] Furino S. et al. // Nucl. Instr. Meth. 1996. Vol. B107. P. 223.
- [4] Betz H.D. // Rev. Mod. Phys. 1972. Vol. 44. P. 465.

- [5] *Izui K.* // J. Phys. Soc. Jap. 1965. Vol. 20. P. 915.
- [6] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Наука, 1974. № 148.
- [7] *Конуэлл Э.* Кинетические свойства полупроводников в сильных электрических полях. М.: Мир, 1970. 384 с.