

02.3

Пространственное распределение каналируемых ионов и пробеги изотопов водорода в кристаллическом кремнии и вольфраме

© Д.С. Мелузова, П.Ю. Бабенко, А.П. Шергин, А.Н. Зиновьев

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия
E-mail: dmeluzova@gmail.com

Поступило в Редакцию 12 сентября 2019 г.

В окончательной редакции 12 сентября 2019 г.

Принято к публикации 6 декабря 2019 г.

Рассчитаны пробеги ионов H, D в кристаллическом Si и W. Показано, что с ростом энергии ионов распределение пробегов по глубине распадается на две компоненты: одна связана с рассеянием атомов в поверхностных слоях, а другая характеризует частицы, захваченные в канал. Обнаружено новое явление: после прохождения небольшого расстояния формируется устойчивая пространственная структура компоненты пучка, захваченной в канал. При торможении ионов начинается переход частиц в соседние каналы, и вблизи точки остановки пространственная структура пучка частиц, захваченных в канал, разрушается. Предложена схема эксперимента, позволяющая связать полученное пространственное распределение с угловыми распределениями вылетевших частиц.

Ключевые слова: каналирование, пространственное распределение, кристалл, пробеги.

DOI: 10.21883/PJTF.2020.05.49106.18034

Эффект каналирования был открыт Робинсоном и Оеном в 1963 г. [1] в результате численного моделирования проникновения ионов в кристалл. Теория каналирования два года спустя была разработана Линдхардом [2]. В СССР значительный вклад в изучение каналирования и других ориентационных эффектов внес Тулинов [3].

Подробное описание изучения каналирования и областей применения данного эффекта представлено в обзоре [4]. Результаты расчетов и экспериментов по измерению пробегов каналированных атомов водорода в кремнии можно найти в [5–7]. Моделирование каналирования релятивистских протонов было рассмотрено в [8,9]. В [10] анализируется точность существующих методов моделирования каналирования.

Задачей настоящей работы является исследование формирования пространственного распределения каналируемых ионов в кристалле и его трансформации при прохождении через кристалл.

В качестве объекта исследования мы выбрали торможение атомов водорода и дейтерия в кристаллическом кремнии и вольфраме. Выбор кремния был обусловлен наличием экспериментальных данных о пробегах и их распределении по глубине, что позволяет проверить точность разработанных нами методов расчета. В случае кристаллического вольфрама экспериментальные данные отсутствуют. Выбор поверхности W(100) обусловлен тем, что кристалл вольфрама обладает простой кристаллографической структурой — кубической объемно центрированной, а большое различие в массах налетающей частицы и атомов мишени, по нашему мнению, должно было способствовать формированию пространственного распределения компоненты частиц, захваченных в канал. Данное явление, а именно формирование

пространственного распределения каналируемых частиц, ранее не изучалось.

Численное моделирование проводилось с помощью расчета траекторий частиц [11] с использованием потенциала, полученного в результате применения метода функционала плотности (DFT) [12]. Поверхность кристалла подвергалась бомбардировке моноэнергетическим пучком, и для каждой имплантированной частицы фиксировался ее проективный пробег.

Для проверки правильности получаемых результатов была выбрана система H–Si(100), для которой имеются экспериментальные данные о пробегах. На рис. 1, а представлены зависимости среднего проективного пробега от энергии налетающих частиц для системы H–Si(100) в случае перпендикулярного падения налетающих частиц и в случае отклонения пучка на 7° от оси кристалла. Как видно из рисунка, расчет методом траекторий с использованием DFT-потенциала согласуется с экспериментальными данными из работы [7].

Для случая бомбардировки поверхности W(100) атомами D были рассчитаны проективные пробеги и их распределение по глубине материала при разных значениях энергии налетающих частиц и для различной ориентации пучка относительно поверхности. На рис. 1, б представлены распределения пробегов по глубине материала для системы D–W(100) в случае ориентации пучка перпендикулярно поверхности для разных энергий налетающих частиц. Как видно из рисунка, с ростом энергии ионов распределение пробегов по глубине распадается на две компоненты: одна связана со случайным рассеянием атомов в поверхностных слоях, а другая характеризует частицы, захваченные в канал. Данное расслоение наблюдалось экспериментально для системы K–W(111) [13]. В исследованном нами случае рассеяния

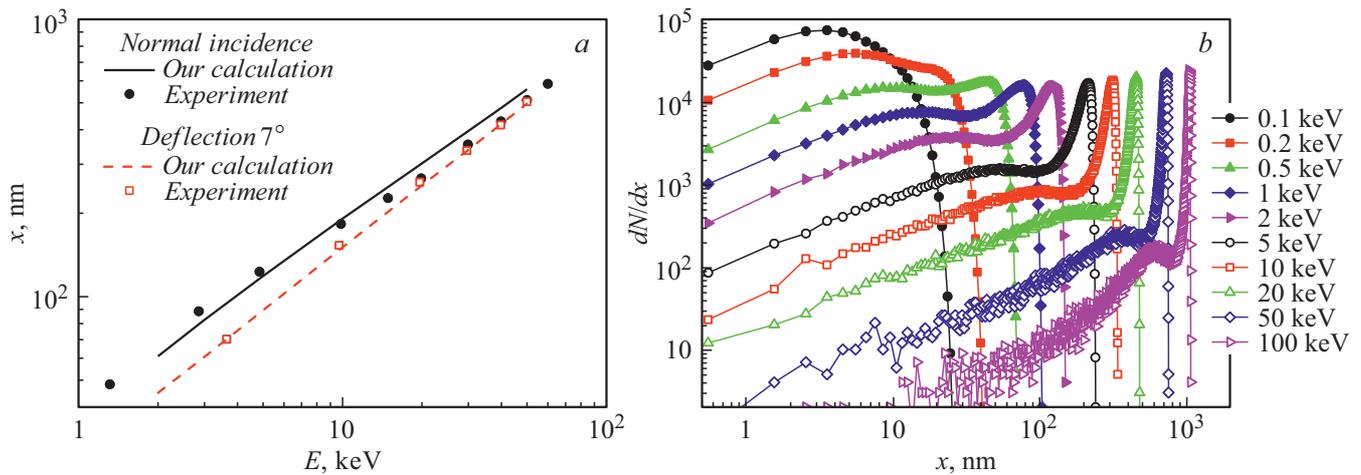


Рис. 1. *a* — зависимость среднего проективного пробега x от энергии налетающих частиц E для системы H–Si(100) в случае перпендикулярного падения пучка (сплошная линия) и в случае отклонения на 7° (штриховая). Линия — расчет, точки — экспериментальные данные [7]. *b* — распределения пробегов по глубине материала для системы D–W(100) в случае ориентации пучка под углом 0° к нормали при энергии налетающих частиц в диапазоне 0.1–100 keV.

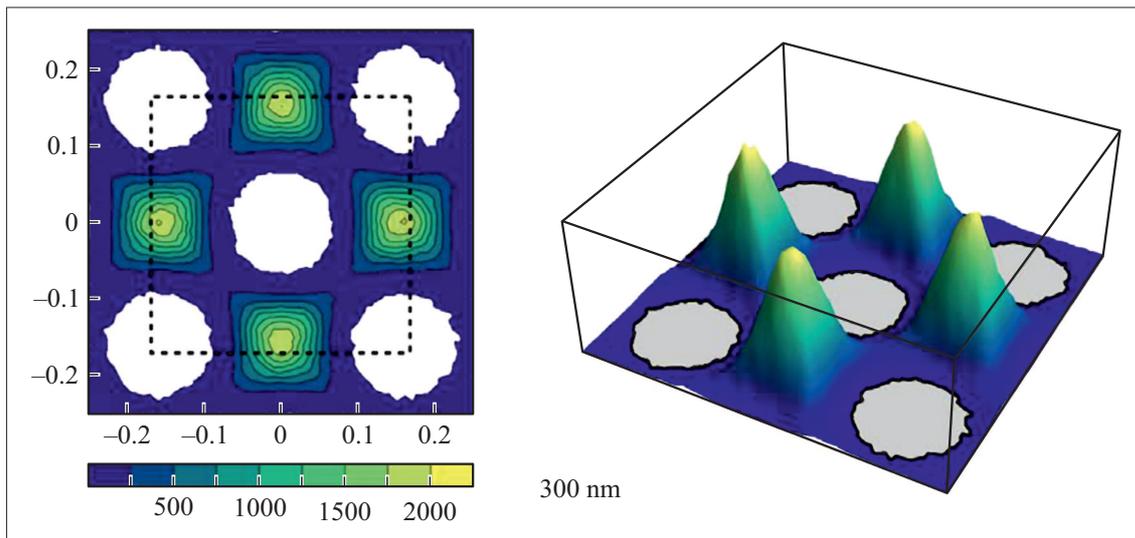


Рис. 2. Пространственное распределение атомов D на глубине 300 nm в W(100), начальная энергия налетающих частиц 100 keV. На осях — расстояние (в nm). Шкала оттенков серого (цветовая шкала в электронной версии статьи) показывает количество частиц, зарегистрированных в каждой точке пространства. Пунктирный квадрат — область облучения пучком D.

легкой частицы данное явление проявляется более ярко и компоненты лучше разделены (рис. 1, *b*).

С целью проверки правильности подобной интерпретации были выполнены расчеты распределения пробегов по глубине для системы D–W(100) при разных углах падения налетающих частиц, отсчитываемых от нормали к поверхности кристалла. При отклонении направления пучка от кристаллической оси на 0 – 6° происходит перестройка распределения пробегов частиц по глубине, при этом уменьшается доля частиц, захваченных в канал.

Расчеты, проводимые с помощью нашего кода, дают возможность получить пространственное распределение налетающих частиц на любой глубине. На рис. 2 пред-

ставлено пространственное распределение частиц на глубине 300 nm для системы D–W(100) при энергии налетающих частиц 100 keV. Пучком атомов D была засвечена одна элементарная ячейка площадью $(2d)^2$ (где $d = 0.158$ nm), показанная на рис. 2 пунктирным квадратом. Шкала оттенков серого (цветовая шкала в электронной версии статьи) показывает количество частиц, зарегистрированных в каждой точке пространства. Расчет проводился для 10^6 налетающих частиц, равномерно заселяющих выделенную площадку. В расчете учитывались тепловые колебания атомов решетки. Амплитуда колебаний принималась равной 0.005 nm. Интересным фактом явилось обнаружение возникновения

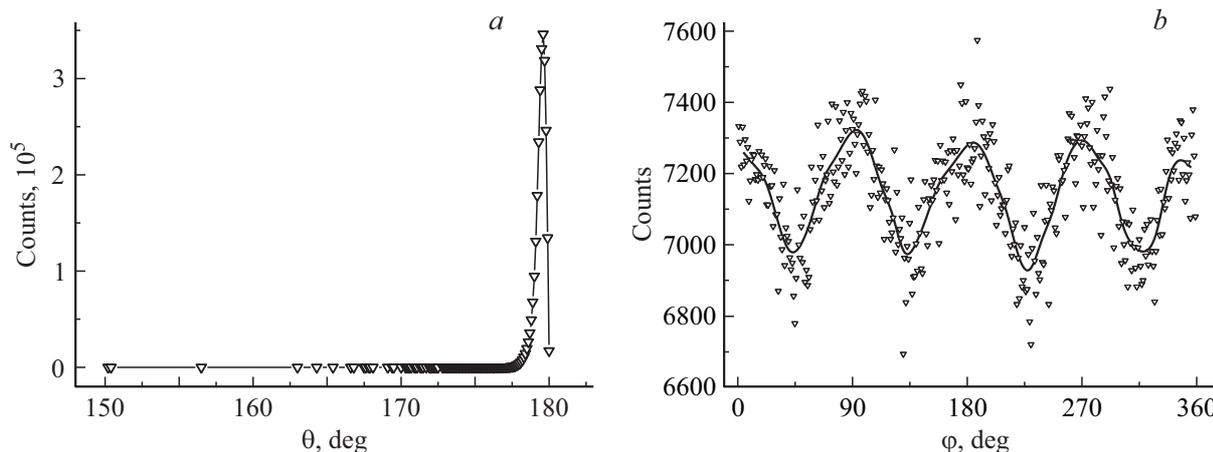


Рис. 3. Распределения вылетевших частиц по углу θ (угол относительно нормали к поверхности) (а) и азимутальному углу φ (б). Толщина мишени 300 nm, начальная энергия налетающих частиц 100 keV.

четкого пространственного распределения сформированного пучка каналируемых частиц. Как видно из рис. 2, при прохождении через кристалл налетающие атомы равномерно распределяются по каналам и образуют четкую пространственную структуру. Ранее этот эффект наблюдался при моделировании каналирования в системе H–Si(111) для энергии протонов 2 MeV [14]. Изучаемая нами система имеет другую кристаллическую структуру, и моделирование проводилось для диапазона существенно меньших энергий (0.1–100 keV).

Для того чтобы проследить эволюцию пространственной картины для одного канала, было проведено аналогичное моделирование с засвечиванием более узкой области размером d^2 . Расчет проводился для $2.5 \cdot 10^5$ налетающих частиц. На начальном этапе при прохождении 100 nm захваченные в канал частицы образуют характерное пространственное распределение пирамидальной формы с ориентацией углов „пирамиды“ вдоль потенциальных долин. При начальной энергии частиц 100 keV пробег в вольфраме составляет около 1000 nm. При прохождении пучка до расстояния 700 nm пространственное распределение частиц сохраняется. На глубине 900 nm наблюдается интенсивное перетекание частиц в соседние каналы. Вблизи точки остановки частиц пространственная структура пучка, захваченного в канал, разрушается.

Образование четкого пространственного распределения пучка каналированных частиц, на наш взгляд, обусловлено многократностью соударений частиц пучка с атомами решетки, которые имеют случайные положения в пространстве вследствие учета тепловых колебаний.

Для проверки полученного результата можно предложить следующий эксперимент. Начальная энергия частиц и толщина мишени выбираются таким образом, чтобы вылет из мишени происходил, когда пространственное распределение каналируемых частиц сформировалось, но еще не разрушилось. Например, можно выбрать толщину мишени 300 nm и начальную энер-

гию налетающих частиц 100 keV. Для этих условий на рис. 3, а, б представлены распределения вылетевших частиц по углу θ (угол относительно нормали к поверхности) и азимутальному углу φ . Распределение по углу θ позволит получить информацию о распределении потенциала в канале, а распределение по углу φ отражает строение кристалла и может быть использовано для анализа топографии поверхностного слоя пленки.

Если дополнить эксперимент анализом энергетического спектра вылетевших частиц, можно получить интересную информацию о величинах электронных тормозных потерь при движении частицы в канале.

Сформулируем основные выводы.

1. Рассчитаны пробеги ионов водорода в Si(100) при перпендикулярном падении пучка на поверхность и при отклонении от нормали. Результаты обоих расчетов находятся в хорошем согласии с экспериментом.

2. В результате расчета пробегов атомов дейтерия в W(100) было показано, что с ростом энергии ионов распределение пробегов по глубине распадается на две компоненты, одна из которых связана со случайным рассеянием атомов в поверхностных слоях, а другая характеризует частицы, движущиеся по каналу.

3. Обнаружено образование устойчивой пространственной структуры пучка частиц, захваченных в канал, и исследована зависимость этого пространственного распределения от пройденного расстояния. Показано, что пространственная структура сохраняется вплоть до расстояний, составляющих до 90% от пробега частиц.

4. Предложена схема эксперимента по анализу топографии кристалла и определению характеристик каналирования на основе анализа угловых и энергетических распределений вылетевших частиц.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ для Федераль-

ного государственного бюджетного учреждения науки Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] *Robinson M.T., Oen O.S.* // Appl. Phys. Lett. 1963. V. 2. P. 30–32. DOI: 10.1063/1.1753757
- [2] *Lindhard J.* // Kgl. Dan. Viden. Sels. Mat.-Fys. Medd. 1965. V. 14. P. 34.
- [3] *Тушинов А.Ф.* // УФН. 1967. Т. 87. № 12. С. 585–598. DOI: 10.3367/UFNr.0087.196512a.0585
- [4] *Vantomme A.* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 2016. V. 371. P. 12–26. DOI: 10.1016/j.nimb.2015.11.035
- [5] *Ćosić M., Nešković N., Petrović S.* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 2019. V. 444. P. 10–22. DOI: 10.1016/j.nimb.2019.02.004
- [6] *Hobler G., Bourdelle K.K., Akatsu T.* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 2006. V. 242. P. 617–619. DOI: 10.1016/j.nimb.2005.08.181
- [7] *Ligeon E., Guivarc'h A.* // Rad. Eff. 1976. V. 27. P. 129–137. DOI: 10.1080/00337577608243025
- [8] *Коцеев В.П., Моргун Д.А., Штанов Ю.Н.* // Письма в ЖТФ. 2012. Т. 38. В. 12. С. 87–94.
- [9] *Коцеев В.П., Моргун Д.А., Штанов Ю.Н.* // Письма в ЖТФ. 2013. Т. 39. В. 20. С. 77–86.
- [10] *Hobler G., Nordlund K.* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 2019. V. 449. P. 17–21. DOI: 10.1016/j.nimb.2019.04.029
- [11] *Мелузова Д.С., Бабенко П.Ю., Шергин А.П., Зиновьев А.Н.* // Поверхность. 2019. Т. 4. С. 74–78. DOI: 10.1134/S0207352819040127
- [12] *Zinoviev A.N., Norlund K.* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 2017. V. 406. P. 511–517. DOI: 10.1016/j.nimb.2017.03.047
- [13] *Мейер Д., Эрикссон Л., Девис Д.* Ионное легирование полупроводников. М.: Мир, 1973. С. 59.
- [14] *Motapothula M.R., Breese M.B.H.* // Eur. Phys. J. B. 2018. V. 91. P. 49. DOI: 10.1140/epjb/e2018-80580-4