

03,10

Каналирование медленных ионов в монокристаллическом кремнии

© А.Б. Свечников

Научно-исследовательский центр „Курчатовский институт“,
Москва, Россия

E-mail: asvech@mail.ru

Поступила в Редакцию 22 июня 2020 г.

В окончательной редакции 22 июня 2020 г.

Принята к публикации 6 августа 2020 г.

Профили распределения ионов Si^+ по глубине монокристаллического кремния рассчитаны методом молекулярной динамики. Неупругие потери энергии при торможении определены в рамках теории функционала электронной плотности. Выполнен анализ факторов, оказывающих влияние на процесс каналирования ионов. В частности, подтверждено существование „эффекта массы“ для критического угла каналирования.

Ключевые слова: каналирование ионов, молекулярная динамика, торможение.

DOI: 10.21883/FTT.2020.12.50208.135

1. Введение

Процессы торможения быстрых ионов в твердых телах представляют большой практический интерес в области ионной имплантации полупроводниковых материалов. Серьезные проблемы создают быстрые атомы отдачи, возникающие в стенках ядерных реакторов под воздействием нейтронов, приводя к радиационным повреждениям. Ионы после потери кинетической энергии и остановки формируют профили распределения по глубине, которые наблюдают экспериментально или получают в модельных расчетах. Тормозные потери ионов принято разделять на ядерные и электронные, вследствие упругих соударений иона с ядрами и неупругих потерь на электронах атомов твердого тела соответственно. Физическая природа данных типов торможения настолько различна, что теоретикам приходится решать две отдельные задачи. Экспериментальные данные относятся к полным потерям энергии иона, и публикуемые вклады отдельных типов торможения носят оценочный характер [1].

Профили распределения ионов по глубине в аморфных телах и кристаллических структурах произвольной ориентации имеют одинаковый вид, что является следствием одинаковой природы процессов торможения в среде, характеризуемой атомным составом и плотностью. В начале 1960-х годов экспериментально и теоретически было показано [2,3], что симметрия кристаллической решетки может быть причиной заметного увеличения длин пробега ионов, т.е. анизотропией торможения ионов, получившей название каналирование. Физически каналирование связывают с перемещением иона в области пониженной электронной плотности атомов решетки и низкими упругими потерями. В каналах снижается вероятность рассеяния иона на атомах решетки под большими углами. Череду „мягких“ столкновений удерживает ион в канале, приводя к удлинению трека в разы по сравнению с торможением в том же кристалле, но в случайном направлении. Различают

осевое и планарное каналирование, в зависимости от типа симметрии кристаллической решетки и направления движения иона.

В качестве иллюстрации на рис. 1 показано распределение электронной плотности в виде изоповерхности для грани $\langle 100 \rangle$ Si, рассчитанной нами в приближении функционала электронной плотности (модифицированный код *abinit* [4]). Можно наблюдать отверстия в изоповерхности, совпадающие с „пустотами“ в решетке, через которые может осуществляться осевое каналирование ионов.

Настоящая работа посвящена моделированию процесса каналирования методом молекулярной динамики. Рассматриваются профили распределения ионов кремния в монокристаллическом кремнии с ориентацией $\langle 100 \rangle$ при низких дозах облучения. Основное внимание

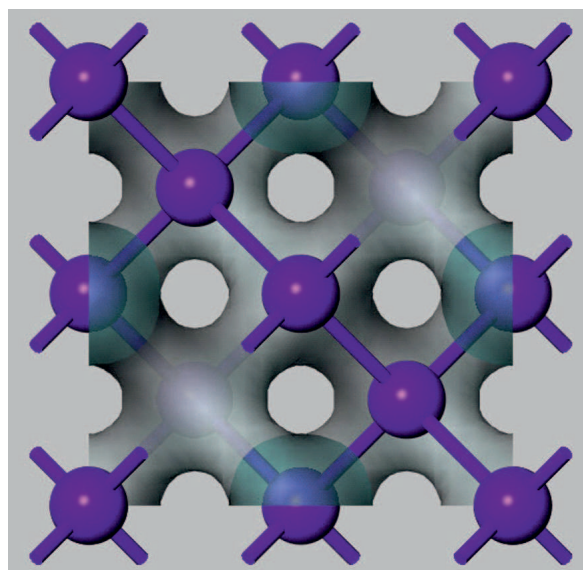


Рис. 1. Изоповерхность плотности электронов (величина 0.07) для $\langle 100 \rangle$ Si.

уделяется физическим факторам, являющимся помехой для каналирования ионов.

Отметим, что большинство авторов, ссылки на работы которых можно найти в цитируемой литературе, рассматривает каналирование в кремнии с целью оптимизации процесса легирования, где первую роль играют ионы бора и фосфора. По нашему мнению, медленные ионы могут быть использованы для инициализации структурных изменений на определенных глубинах от поверхности монокристаллической грани. Представленные ниже профили распределения ионов дают возможность проанализировать эволюцию структурных дефектов в монокристаллическом кремнии, однако эта задача выходит за рамки данной работы. Также было учтено практически полное отсутствие литературных данных по каналированию ионов кремния.

В основу моделирования легла методика неэмпирического расчета электронных тормозных потерь, объединенная с решением классической задачи упругого рассеяния на экранированном кулоновском потенциале. С помощью многочастичного потенциала воспроизводилась динамика столкновений и теплового движения атомов решетки кремния. Траектория движения иона в кристаллической структуре рассчитывалась путем интегрирования классических уравнений движения по стандартной схеме предиктор-корректор. Шаг интегрирования варьировался в зависимости от текущей кинетической энергии иона, например, для 10 keV имел значения порядка $10^{-17} - 10^{-16}$ с. Для построения отдельного профиля распределения ионов по глубине выполнялся расчет 10000 треков, местом остановки иона являлось положение, где кинетическая энергия иона была меньше 1 eV. График профиля представляет сглаженную гистограмму с числом интервалов порядка 200.

Анализ профиля распределения каналирования ионов показал наличие трех групп ионов с характерными особенностями динамики торможения. На основе сравнения профилей распределения проанализирована восприимчивость эффекта осевого каналирования к температуре кристалла, углу падения иона на поверхность и начальной энергии иона. В заключении рассмотрен вопрос о влиянии массы иона на характер каналирования, т.н. изотопный эффект, вызывающий споры среди исследователей.

2. Методика расчета

2.1. Геометрия

Кристаллическая структура решетки кремния без примесей и дефектов с ориентацией $\langle 100 \rangle$ моделировалась ячейкой порядка 100 атомов. Влияние температуры на решетку учитывалось с помощью [5]:

$$\langle \Delta r^2 \rangle = \frac{9\hbar T}{MkT_D^2}, \quad (1)$$

где $\langle \Delta r^2 \rangle$ — среднее смещение атомов из узлов идеальной решетки, T — температура решетки, $T_D = 645$ К

соответствует температуре Дебая для кремния, M — масса атома кремния, \hbar и k — постоянные Планка и Больцмана. Поправки к координатам атомов рассчитывались с помощью функции $\langle \Delta r^2 \rangle$ и случайных чисел.

Выбор граничных условий обеспечивал перемещение иона в решетке без дефектов, а для сохранения размера ячейки и экономии памяти часть атомов решетки позади иона удалялась.

Начальная высота иона над кристаллом составляла несколько ангстрем, две остальные координаты в плоскости грани, выбирались случайным образом. Величина начальной скорости иона соответствовала выбранной энергии, направление составляло фиксированный угол (α) с нормалью к поверхности. Для оптимального каналирования требуется выбор $\alpha = 0^\circ$.

2.2. Взаимодействие

В монокристаллическом кремнии атомы имеют характерное тетраэдрическое окружение. Исследования показали, что с помощью лишь двухатомных (парных) потенциалов взаимодействия воспроизвести данную структуру не удастся, необходимо добавление трехатомных вкладов. В настоящей работе использовался зависящий от окружающей среды межатомный потенциал (EDIP) Базанта–Кашираса [6]:

$$V_{\text{Si-Si}} = V_2 + V_3, \quad (2)$$

где V_2 — парные вклады, зависящие от межатомных расстояний и функции координационного числа, V_3 — трехатомные вклады также зависят от углов между атомными связями. Опыт использования потенциала EDIP показал его высокую точность в описании кристаллических и аморфных структур, однако он требователен к производительности вычислений.

Ион–атомные столкновения моделировались универсальным потенциалом отталкивания [7]:

$$V_{i-\text{Si}} = \frac{Z_i Z_{\text{Si}} e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \varphi\left(\frac{r}{a}\right),$$

где $\varphi(x)$ — функция экранирования, Z_i , Z_{Si} — атомные номера иона и атома среды (Si), e — заряд электрона, r — межъядерное расстояние, a — длина экранирования

$$a = \frac{0.4685}{Z_i^{0.23} + Z_{\text{Si}}^{0.23}}.$$

Потенциал $V_{i-\text{Si}}$ используется в приложении TRIM [7] для вычисления углов рассеяния ионов низких энергий, когда резерфордское приближение дает плохие результаты.

2.3. Неупругие потери

В рамках современной теории не существует единого универсального метода определения неупругих потерь

энергии ионом (E_i) в твердом теле для всего спектра энергий. В литературе различают следующие ионы: 1) быстрые $V_i > v_0 Z_i^{2/3}$ и $V_i > v_0 Z_{Si}^{2/3}$; 2) промежуточные $V_i \approx v_0 \approx v_F$; 3) медленные $V_i < v_0$, где V_i — скорость иона, v_0 — боровская скорость, v_F — скорость Ферми атома среды. Для иона Si^+ в кристаллическом Si имеем $Z_i = Z_{Si} = 14$, $v_F = 2.131 \cdot 10^6$ м/с, $v_0 = 2.188 \cdot 10^6$ м/с. Определим типичные значения энергий для быстрых, промежуточных и медленных ионов Si^+ и рассмотрим методы расчета электронного торможения.

Ионы Si с промежуточными энергиями около 0.66 MeV использовались нами в небольшом количестве расчетов, рассмотрим их неупругое торможение подробнее.

Быстрые ионы Si с энергиями 23 MeV и выше представляют собой голые ядра с зарядом $Z_i e$, неупругие потери описываются теорией Бете с поправкой Блоха. В настоящей работе быстрые ионы не рассматривались.

Ионы Si с промежуточными энергиями около 0.66 MeV торможение подробнее. Предполагается, что ион заряжен частично, и часть электронов ближайшего к иону атома среды находится в возбужденном состоянии. В работе использовалось полуэмпирическое приближение Циглера–Бирсака–Литтмарка (ZBL, [7]). Пусть ион несет на себе N электронов, определим степень ионизации иона $q = Q/Z_i$, где $Q = (Z_i - N) \cdot e$ — ионное зарядовое число. Используя известные данные по потерям протонов с той же энергией в той же среде (S_p), определяют потери иона (S) с помощью „правила масштабирования для тяжелых ионов“

$$S = \gamma Z_i^2 S_p, \quad (3)$$

и вычисляют γ — эффективный заряд иона, зависящий от степени ионизации и размера иона (Λ):

$$\gamma = q + \frac{(1-q)v_0^2}{2v_F^2} \ln \left[1 + \left(\frac{4\Lambda v_F}{1.919} \right)^2 \right],$$

$$\Lambda = \frac{2aa_0 \left(\frac{N}{Z_i} \right)^{2/3}}{Z_i^{1/3} (1 - \lambda \frac{N}{Z_i}) / 4},$$

где $a = 0.24$, $a_0 = 0.529 \cdot 10^{-8}$ см, $\lambda = 4/7$.

В основе приближения лежит теория линейного отклика, где сначала находят заряды, наведенные на атоме среды, а затем вычисляют тормозную кулоновскую силу, действующую обратно на ион. Несколько грубо в теории выглядит учет динамического отклика от газа свободных электронов, однако, привлечение экспериментальных данных значительно улучшает результаты. Приближение ZBL реализовано в приложении TRIM [7].

Медленные ионы Si с энергиями заметно ниже 0.66 MeV (нами использовался верхний порог в 0.4 MeV) представляют собой практически нейтральные атомы Si, причем валентные электроны ближайшего к иону атома Si среды могут быть возбуждены. Квазиклассические теории торможения Фирсова [8] и группы Линдхарда [9]

несмотря на упрощенное описание взаимодействия иона с атомом среды успешно воспроизводили линейную зависимость S от V_i . Однако впоследствии выяснилось, что зависимость не является линейной [10].

Рассмотрим схему строгого расчета неупругого торможения в рамках неэмпирических квантовых расчетов электронной структуры медленных ионов и окружающих атомов среды. Начальный этап включает расчет пространственного распределения электронной плотности $n(r)$ в монокристаллическом Si. Мы воспользовались модифицированным кодом *abinit* [4] в приближении локальной плотности теории функционала электронной плотности с обобщенной градиентной аппроксимацией Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE GGA) [11] для обменно-корреляционной энергии. Не вдаваясь в сложный анализ, отметим, что точный вид $n(r)$ очень важен при расчете неупругих потерь, не следует экономить с однородным [12] и сферически симметричным [13] распределениями электронной плотности.

Далее будем следовать в русле модели торможения, изложенной авторами [13]. Ключевым моментом будет использование функции одноэлектронного радиуса (r_s), которая связана с электронной плотностью и скоростью Ферми следующим образом:

$$\frac{4\pi}{3} r_s(r)^3 = \frac{1}{n(r)}, \quad r_s(r) = \frac{v_F(r)}{1.919}.$$

Теперь неупругие потери [8] для неоднородного распределения электронов имеют вид

$$S = \frac{3V_i}{v_F r_s(r)^3} \sum_L (L+1) \sin^2[\delta_L(v_F) - \delta_{L+1}(v_F)], \quad (4)$$

где L — индекс парциальной волны, $\delta_L(v_F) \equiv \delta_L(v_F(r))$ — фазовый сдвиг для рассеянного электрона на поверхности Ферми, который находится из асимптоты волновой функции

$$u_L \rightarrow A_L \sin \left(kr - \frac{\pi L}{2} + \delta_L \right) \text{ при } r \rightarrow \infty.$$

Значения u_L для фиксированного значения r_s являются решениями радиального уравнения Шредингера [14]:

$$\frac{d^2 u_L}{dr^2} + \left[k^2 - 2V(r) - \frac{L(L+1)}{r^2} \right] u_L = 0.$$

Потенциал рассеяния

$$V(r) = \frac{Z_i}{r} \exp \left(-\frac{\alpha}{r} \right)$$

— экранированный кулоновский потенциал с параметром α . Здесь вместо стандартной процедуры вычисления самосогласованного нелинейного потенциала рассеяния методом функционала электронной плотности [12] используется простой потенциал Юкавы. Расчет, однако, усложняется необходимостью оптимизации параметра

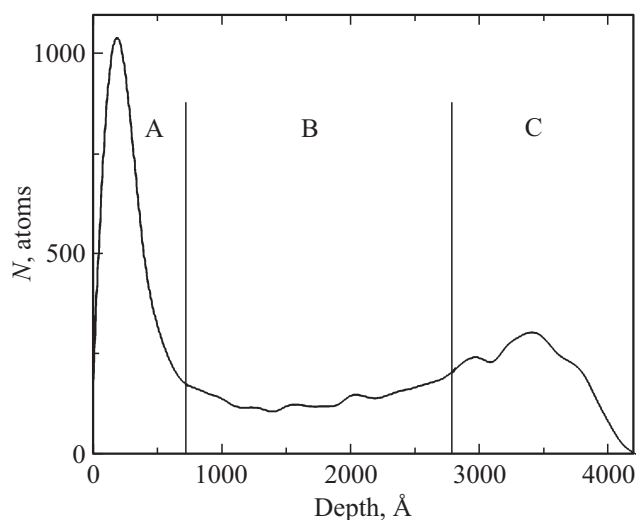


Рис. 2. Профиль распределения ионов Si^+ по глубине.

экранирования α , состоящего в выполнении правила сумм Фриделя для фазовых сдвигов

$$\frac{2}{\pi} \sum_L (2L + 1) \delta_L(v_F) = Z_i.$$

Данные в виде таблиц $S(V_i, r)$, eV/Å сохраняются на носителе. Затем, после линейной интерполяции и умножения на длину пробега иона за шаг интегрирования уравнений Ньютона, получаем величину энергии неупругого торможения.

Представленная выше схема неэмпирического расчета торможения медленных ионов является особенно актуальной для полупроводников и диэлектриков. Например, известная нелинейная модель [12] опирается на теорию электронного газа и не подходит для нашего случая. В чистом кремнии имеется небольшая запрещенная зона, и отсутствуют свободные электроны. Следовательно,

Доли ионов (в процентах от общего числа) Si^+ с $E_i = 10 \text{ keV}$, приходящиеся на области профиля распределения (рис. 2), в зависимости от температуры кристалла Si

T , К	A, вне канала	B, выход из канала	C, каналирование
0	22	18	60
300	31	25	44
600	34	28	38
1000	38	30	32
1500	42	29	29

неупругие потери иона выступают источником локальных электронных возбуждений, включая образование электрон-дырочных пар.

3. Результаты

3.1. Анализ распределения ионов по глубине кристалла

Профиль распределения ионов по глубине кристалла имеет характерные особенности. На рис. 2 представлен результат расчета для ионов кремния с начальной энергией $E_i = 10 \text{ keV}$ и углом $\alpha = 0^\circ$ при $T = 300 \text{ K}$ (кристалла). Условно можно выделить три области, обозначенные на графике буквами A, B, C.

Область расстояний, обозначенная на рис. 2 буквой A, от 0 до 800 Å соответствует ионам, которым не удалось занять канал. Эти ионы участвовали в жестких столкновениях с атомами решетки и за короткий промежуток времени потеряли энергию. На рис. 3 показано, как изменялась энергия за 1 шаг (ΔE) со временем (t , fs = 10^{-15} s) для случайно выбранного иона с глубиной пробега 185 Å . Последовательность столкновений такова, что в пяти из них ион теряет более 200 eV , замедляясь до 900 eV после 125 fs движения.

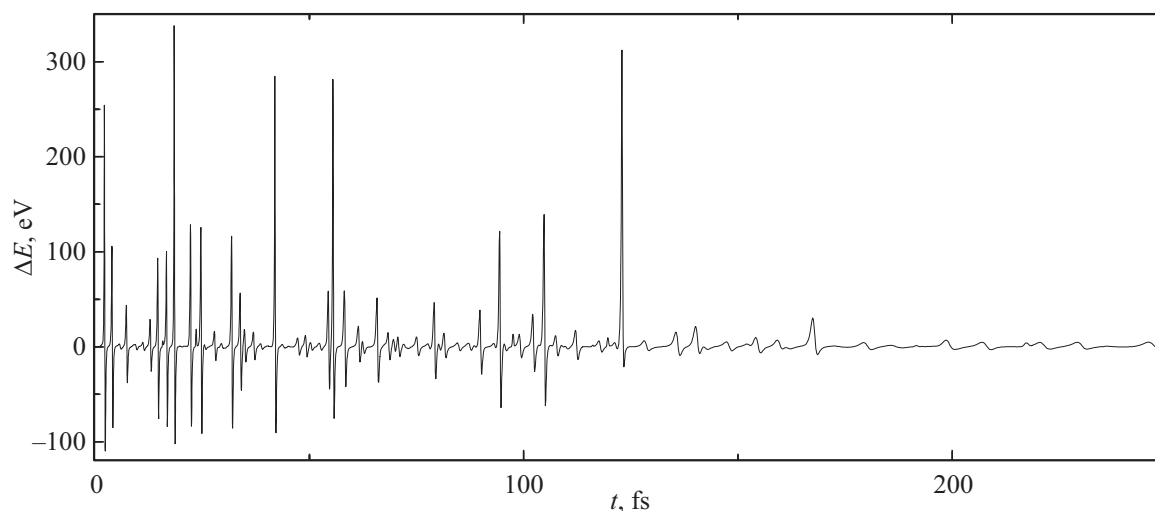


Рис. 3. Потери энергии за шаг ионом Si^+ , находящимся вне канала.

Ионы, успешно встроенные в каналы, через определенное время могут испытать сильное столкновение и остановиться. Такие ионы образуют область профиля распределения, обозначенного на рис. 2 буквой В, с глубиной проникновения от 800 до 2800 Å.

Область С рис. 2, от 2800 до 4000 Å, относится к каналированию ионов. Траектория случайно выбранного иона, остановившегося на глубине 3322 Å, показана на рис. 4. Зигзагообразная кривая ориентирована вдоль оси z — направления начальной скорости иона.

Экспериментальные данные полностью подтверждают наличие двух максимумов и переходной области В на графиках профиля распределения каналированных ионов. Например, авторы [14] приводят профили, аналогичные рис. 2, для ионов P^+ в направлении $\langle 110 \rangle$ Si для E_i от 40 до 400 keV.

Важно отметить, что приведенные в работе результаты характерны для каналирования так называемых „тяжелых“ ионов Si^+ . Опыт расчетов легких ионов, например, изотопов водорода, указывает на присутствие лишь одного пика, обозначенного на рис. 2 буквой С. Можно утверждать, что особенности каналирования ионов имеют комплексный характер, который с успехом может быть воспроизведен в рамках моделирования методом молекулярной динамики.

3.2. Влияние температуры кристалла на профили распределения ионов

Температура кристалла описывалась с помощью амплитуд колебаний атомов, взаимодействующих между собой посредством многочастичного потенциала V_{Si-Si} , выражение (2). Начальные отклонения атомов решетки рассчитывались с помощью T_D по формуле (1). Выясним, насколько тепловой шум влияет на каналирование ионов.

В расчетах использовались ионы Si^+ с $E_i = 10$ keV и углом $\alpha = 0^\circ$. На рис. 5 приведены профили распределения ионов по глубине для нескольких температур кристалла кремния, $T = 0, 300, 600, 1000$ и 1500 K.

Нагрев кристалла препятствует каналированию ионов, переводя все большую часть треков из области С в области А и В, что следует из численных данных в таблице.

Тепловые колебания атомов решетки способствуют увеличению упругого торможения иона, растет вероятность „сильных“ столкновений, выводя ионы из канала. Из смещения пика каналирования влево с ростом температуры, рис. 5, можно сделать вывод об увеличении неупругой компоненты торможения иона. Траектории иона, пересекая области с высокой электронной плотностью, становятся короче.

Из расчетов следует, что скорость деканалирования ионов нелинейно зависит от температуры решетки. Следовательно, условием эффективной реализации каналирования ионов является режим низких температур по сравнению с комнатной.

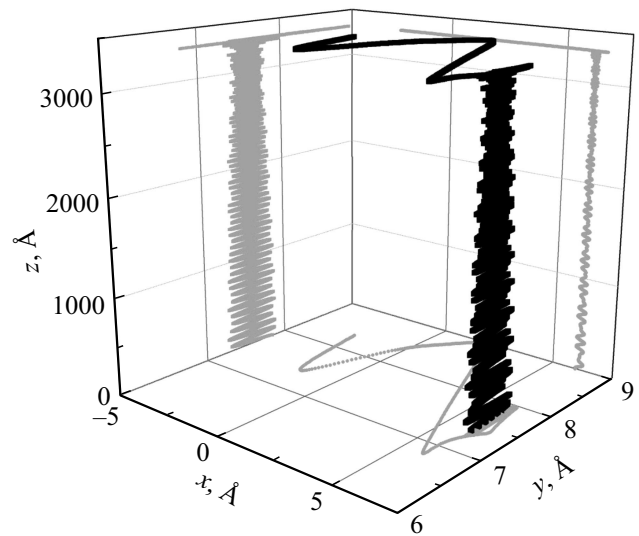


Рис. 4. Траектория иона Si^+ , движущегося в канале.

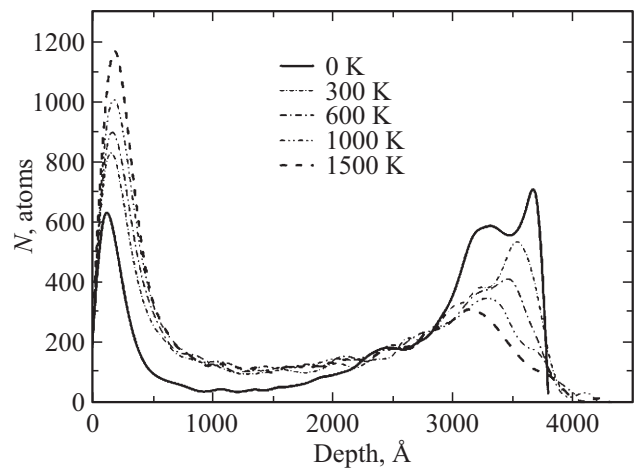


Рис. 5. Температурная зависимость профиля распределения ионов Si^+ .

3.3. Влияние угла падения иона на профили распределения

Совпадение направлений движения иона и симметрии кристалла является основным условием для возникновения осевого каналирования. Малые углы отклонения от оси компенсируются мягким рассеянием на атомах решетки, удерживая ион в канале. Согласно классической статистической теории каналирования [15] существует пороговое значение угла наклона траектории иона к оси, критический угол Линдхарда, при котором ион не может удержаться в канале. Определим с точностью до 1° значение критического угла с помощью анализа профилей распределения ионов Si^+ для фиксированной величины начальной энергии E_i .

Рассмотрим случай, когда ионы кремния с $E_i = 10$ keV проникают в кристалл кремния при $T = 0$ K под различными углами к вектору нормали $\langle 100 \rangle$

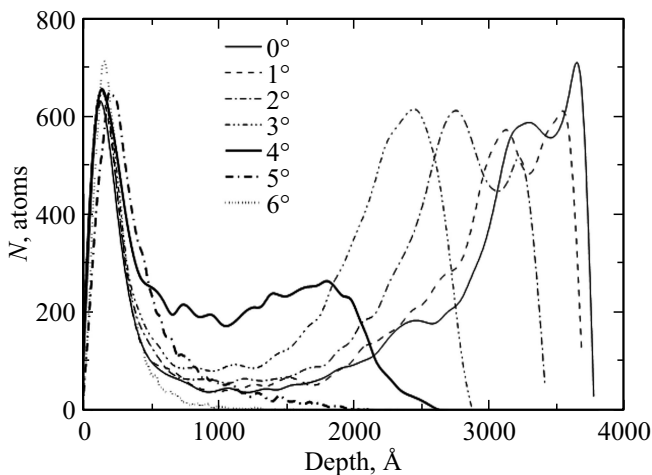


Рис. 6. Определение критического угла Линдхарда по профилям распределения иона Si^+ с энергией 10 keV.

$\alpha = 0^\circ, 1^\circ, \dots, 6^\circ$. Полученные профили показаны на рис. 6.

Пик каналирования на профилях с $\alpha =$ от 0 до 3° последовательно сдвигается влево, что можно связать с усилением торможения. При достижении угла $\alpha = 4^\circ$ профиль заметно изменяется. Форма пика каналирования приобретает размытый вид, и высота уменьшается приблизительно в 3 раза. Каналирование отсутствует для $\alpha = 5$ и 6° , областей В и С на профиле распределения нет. Таким образом, критический угол Линдхарда (α_c) для данных начальных условий равен 4 градусам.

3.4. Влияние начальной энергии иона на профили распределения ионов

Из литературы известно [7], что торможение иона нелинейно зависит от энергии. Упругая и неупругая составляющие торможения имеют максимумы приблизительно при энергиях иона 1 и 100 keV/a.u. соответственно. Данное свойство установлено для аморфных структур и кристаллов произвольной ориентации, следовательно, не включает каналирование. Сравним профили распределения медленных ионов и ионов с промежуточной энергией. Для ионов Si^+ с $E_i > 400$ keV неупругие потери на начальном участке траектории будут рассчитываться по формуле (3), а после замедления до 400 keV по (4). Также выясним зависимость от энергии для профилей ионов с углом падения выше критического. Рассмотрим серию профилей для ионов кремния с начальными энергиями $E_i = 100$ keV, 500 keV и 1 MeV. Температура кристалла $T = 300$ К, углы $\alpha = 0^\circ$ и $\alpha = 7^\circ$.

Для $\alpha = 0^\circ$ профили распределения отвечают каналированию ионов, рис. 7. Пики распределения имеют крутые склоны, сдвигаясь вглубь кристалла с ростом энергии. Положения пиков распределения имеют близкую к логарифмической зависимость от E_i , таким обра-

зом, согласуются с приведенными выше литературными данными об увеличении неупругого торможения с ростом E_i в промежуточном интервале значений.

Иной вид имеют профили распределения для $\alpha = 7^\circ$, рис. 8. Узкий пик при $E_i = 100$ keV последовательно сдвигается вглубь кристалла и имеет более пологие склоны с ростом энергии. Сравнивая рис. 7 и 8 замечаем, что при высоких энергиях некоторая часть ионов, попадающая в кристалл с $\alpha = 7^\circ$, участвует в каналировании. Действительно, доля ионов из области пика 46000 Å на профиле $E_i = 1$ MeV, рис. 8, составляет не менее 8% от общего числа. Таким образом, был сделан вывод о существовании процесса, обратного процессу деканалирования ионов. Для медленных ионов данный процесс не наблюдался.

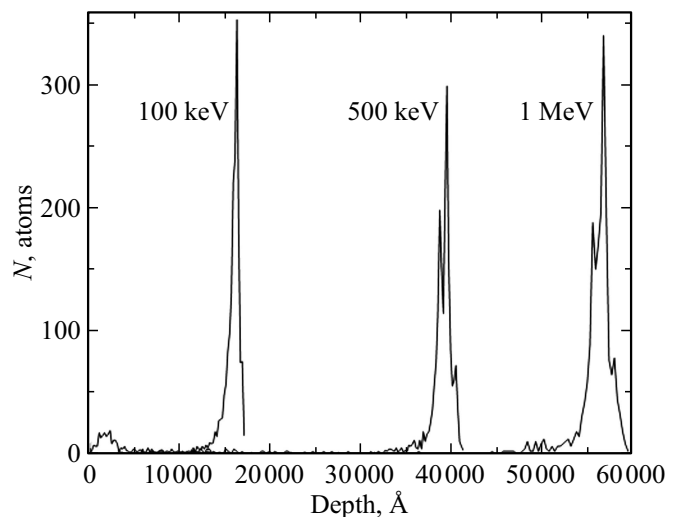


Рис. 7. Профили распределения ионов Si^+ с высокими E_i при $\alpha = 0^\circ$.

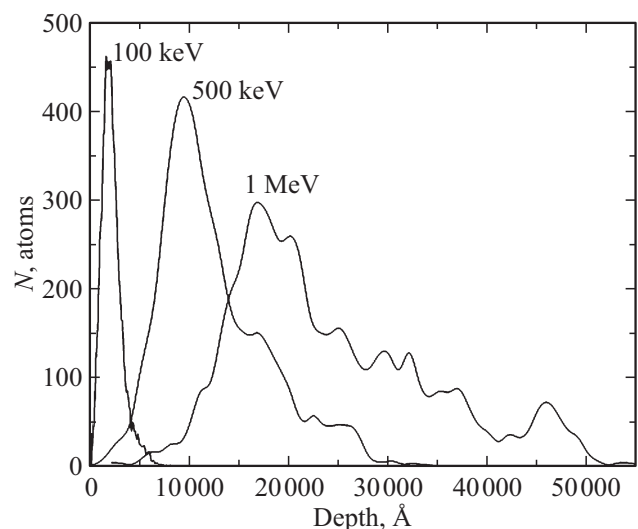


Рис. 8. Профили распределения ионов Si^+ с высокими E_i при $\alpha = 7^\circ$.

3.5. Изотопный эффект

Роль масс ионов с одинаковым атомным номером (зарядом) в процессах каналирования традиционно не рассматривается. Действительно, статистическая теория [15] не содержит каких-либо зависимостей от массы иона или атома решетки. В работе [16] проводилась проверка положений данной теории путем молекулярно-динамических расчетов, и относительно масс теория была подтверждена. В то же время существуют данные модельных расчетов [17,18], из которых следует „эффект массы“ для критического угла каналирования: $\alpha_c \propto \sqrt{M/M_i}$, где M — масса атома решетки, M_i — масса иона.

Выясним степень влияния масс на каналирование путем сравнения профилей распределения по глубине для ионов кремния ^{28}Si (стабильный) и ^{32}Si (170 лет) с массами 27.977 и 31.974 а.е. соответственно, $E_i = 10$ keV и $\alpha = 0^\circ$. Пики каналирования ионов расположены близко, и пик ^{32}Si сдвинут вправо на 100 Å, рис. 9. Наблюдаемый изотопный эффект связан со свойством инерции ионов. Поскольку при равных начальных E_i , более тяжелые частицы имеют большие начальные импульсы (p_i), для их изменения требуется приложение большей силы. Из-за малой разницы масс рассмотренных изотопов Si сдвиг пика каналирования невелик. Проведя аналогичные расчеты ($E_i = 10$ keV и $\alpha = 0^\circ$) для ионов изотопов водорода, нами были получены сдвиги пика каналирования: 960 Å для пары $^1\text{H}^+ - ^2\text{H}^+$ и 710 Å для пары $^2\text{H}^+ - ^3\text{H}^+$.

В заключении рассмотрим „эффект массы“ для критического угла каналирования. Как и прежде $E_i = 10$ keV, $T = 0$ K. Критический угол для иона изотопа ^{28}Si был определен $\alpha_c = 4^\circ$ с помощью профилей распределения на рис. 6. Из серии профилей с $\alpha = 0^\circ, 1^\circ, \dots, 5^\circ$, представленной на рис. 10, находим для ионов ^{32}Si значение $\alpha_c = 2^\circ$. Результат $\alpha_c(^{32}\text{Si}) < \alpha_c(^{28}\text{Si})$ служит подтверждением „эффекта массы“ для критического уг-

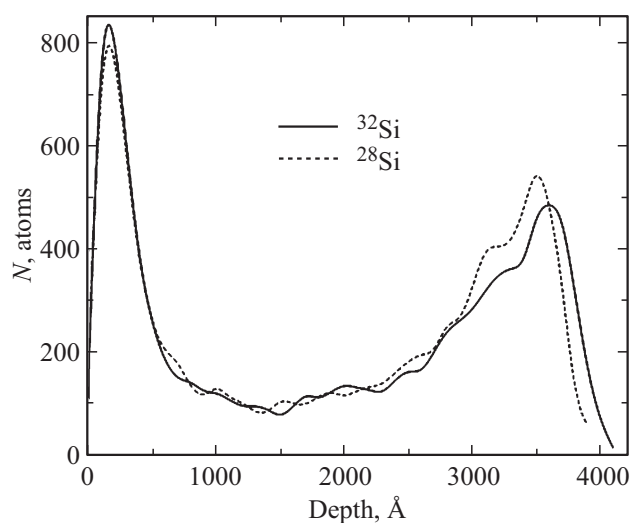


Рис. 9. Профили распределения ионов изотопов Si^+ при $\alpha = 0^\circ$.

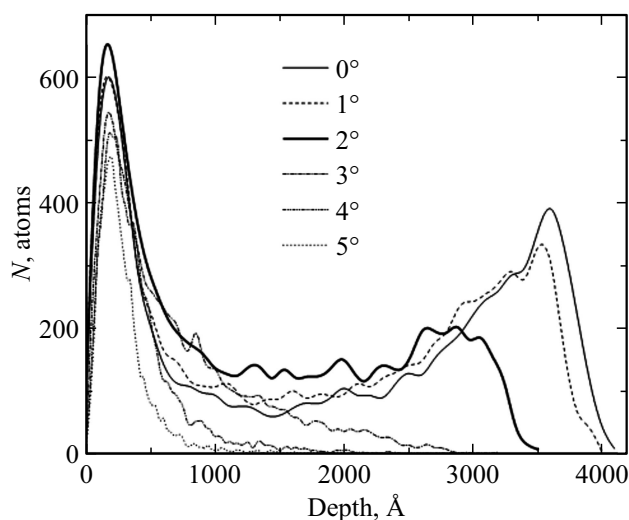


Рис. 10. Определение критического угла по профилям распределения иона $^{32}\text{Si}^+$ с энергией 10 keV.

ла каналирования, и это второе проявление изотопного эффекта.

Демонстрация изотопного эффекта показывает ограниченность статистической теории каналирования, в первую очередь из-за слабого описания динамики процесса. Есть также вопросы к представлению объемной кристаллической структуры в виде цепочек атомов, рассмотрению только одной компоненты энергии иона, перпендикулярной оси канала, и к другим ограничениям.

Вернемся к работе [16] и сделаем необходимые пояснения. Авторы рассчитали каналирование ионов изотопов водорода с $E_i = 10$ keV в направлении $\langle 100 \rangle$ Si. Мы провели подобные расчеты и получили хорошее совпадение результатов. Следует подтвердить вывод об отсутствии „эффекта массы“ для ионов изотопов водорода. Но не об отсутствии эффекта как такового. Ионы водорода, благодаря большому отношению M/M_i демонстрируют ряд особенностей при каналировании. Анализируя профили распределения ионов водорода видно, что область А (рис. 2) отсутствует, а единственный пик каналирования С при достижении критического угла скачком перемещается в приповерхностную область. Важно, что „эффект массы“ в [17,18] получен для нескольких сортов ионов, среди которых самый тяжелый имел массу 222 а.е.

4. Заключение

В работе показано, что процессы каналирования ионов в монокристаллическом кремнии определяются начальными скоростями ионов и температурой решетки. Получено подтверждение изотопной зависимости профиля распределения ионов по глубине и величины критического угла каналирования. Из анализа профилей рас-

пределения ионов средних энергий с большими углами вхождения следует возможность слабого каналирования.

Каналирование медленных ионов представляет собой сложный физический процесс. Возможно, в будущем будет создана простая и достаточно точная теория каналирования, не требующая серьезных вычислительных затрат. В любом случае необходимо проводить сбор имеющихся экспериментальных и теоретических данных по каналированию ионов, как это уже сделано для аморфных систем авторами [1,7].

Практическое значение медленных ионов, безусловно, будет возрастать. Например, уменьшение размеров элементов микросхем напрямую связано с уменьшением энергии в процессах ионной имплантации. Одновременно необходимо повышать качество профилей распределения примеси по глубине подложки.

За рамками работы остались важные вопросы, связанные с присутствием точечных дефектов кристаллической решетки, тонких эпитаксиальных структур. Не проводился анализ перераспределения поглощенной кристаллом энергии ионов.

Благодарности

Автор выражает благодарность П.А. Александрову за большую помощь в обсуждении результатов

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке НИЦ „Курчатовский институт“ (приказ № 1575 от 16.07.2019 г.).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них отсутствует конфликт интересов.

Список литературы

- [1] H. Paul. AIP Conf. Proc. **1525**, 309 (2013).
- [2] M.T. Robinson, D. K. Holmes, O.S. Oen. In *Le Bombardement Ionique* (Centre National de la Recherche Scientifique) Paris (1962). 105 p.
- [3] G.R. Piercy, F. Brown, J.A. Davies, M. McCargo. Phys. Rev. Lett. **10**, 399 (1963).
- [4] X. Gonze, F. Jollet, F. Abreu Araujo etc. Comp. Phys. Commun. **205**, 106 (2016).
- [5] C. Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. Wiley (2004). 704 p.
- [6] J.F. Justo, M.Z. Bazant, E. Kaxiras, V.V. Bulatov, S. Yip. Phys. Rev. B **58**, 2539 (1998).
- [7] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark. *The Stopping and Range of Ions in Matter*. SRIM Company (2008). 683 p.
- [8] О.Б. Фирсов. ЖЭТФ **36**, 1517 (1959).
- [9] J. Lindhard, M. Scharff. Phys. Rev. **124**, 128 (1961).
- [10] P.M. Echenique, R.M. Nieminen, R.H. Ritchie. Solid State Commun. **37**, 779 (1981).
- [11] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).

- [12] T.L. Ferrell, R.H. Ritchie. Phys. Rev. B **16**, 115 (1977).
- [13] J. Calera-Rubio, A. Gras-Martí, N.R. Arista. Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B **93**, 137 (1994).
- [14] С. Сунакава. Квантовая теория рассеяния. Мир, М. (1979). 272 с.
- [15] И. Линдхард. УФН **99**, 249 (1969).
- [16] K. Nordlund, F. Djurabekova, G. Hobler. Phys. Rev. B **94**, 214109 (2016).
- [17] L.-P. Zheng, Z.-Y. Zhu, Y. Li, D.-Z. Zhu, H.-H. Xia. Nucl. Instrum. Meth. B **266**, 849 (2008).
- [18] W. Takeuchi. Nucl. Instrum. Meth. B **269**, 1355 (2011).

Редактор Ю.Э. Кутаев