

01;05;10

Модель термического пика для описания трекообразования в кристаллах полупроводников, облучаемых тяжелыми высокоэнергетическими ионами

© Ф.Ф. Комаров, В.Н. Ювченко

Белорусский государственный университет,
 Научно-исследовательское учреждение Института прикладных физических проблем им. А.Н. Севченко,
 220064 Минск, Белоруссия
 e-mail: paliichuk@pfp.bsu.unibel.by

(Поступило в Редакцию 25 ноября 2002 г.)

Впервые рассмотрена применимость модели термического пика для описания процессов дефектообразования и трекообразования в полупроводниковых кристаллах. Рассмотрено влияние таких параметров модели, как теплоемкость, теплопроводность, коэффициент электрон-фононной связи как функций температуры. Сравнение теоретических данных с результатами экспериментов для кристаллов InP и Ge, облучаемых тяжелыми ионами сверхвысоких энергий, свидетельствует об адекватности этого подхода и возможности получать количественные данные для таких характеристик, как температура локальной области около траектории иона, диаметры расплавленной области и экспериментально регистрируемой трековой области. В частности, предсказанный теоретически диаметр цилиндрической расплавленной области, образующейся при прохождении ионов Xe^+ с энергией 250 MeV в InP, составляет 20 nm, а диаметры регистрируемых методом просвечивающей электронной микроскопии поперечного сечения треков составляют 7–15 nm.

Введение

К настоящему времени предложено несколько подходов к описанию процессов трекообразования в твердых телах при высокоэнергетической ионной имплантации. Основными из них являются модель термического пика, кулоновского взрыва [1], формирования ударных волн [2], модифицированного потенциала решетки [3] и плазменного ядра трековой области [4].

Большинство экспериментальных данных по дефектообразованию и трекообразованию в металлах, полупроводниках и диэлектриках при облучении их тяжелыми ионами сверхвысоких энергий обсуждается с учетом предположения об образовании сильновозбужденной области около траектории иона, расплавлении ее и последующей быстрой закалке. Физическое и математическое описание этого процесса, получившее название „модель термического пика“, были впервые предложены в работе [5]. К настоящему времени эта модель была успешно использована для объяснения эффектов трекообразования в некоторых металлах [6] и диэлектриках [7]. Для случая полупроводников количественное рассмотрение процессов трекообразования в рамках модели термического пика приводится впервые.

Описание модели

В модели термического пика учитывается то, что быстрый тяжелый ион при прохождении через вещество основную долю энергии отдает электронам (для ионов с кинетической энергией $E \geq 1 \text{ MeV/u}$ интенсивность выделения энергии в электронную подсистему на 3–4 порядка превышает выделение энергии в ядерную

подсистему). Передача энергии от электронной подсистемы в решетку считается происходящей главным образом через электрон-фононные взаимодействия. Так как время установления термодинамического равновесия в электронной и ядерной подсистемах значительно меньше, чем время релаксации между ними, можно говорить о температуре решетки и температуре электронов. Критерием возникновения трека считается повышение температуры локальной области мишени до температуры плавления.

Таким образом, по отношению к электронному газу и атомной решетке кристалла можно использовать следующую систему связанных уравнений для тепловых потоков, записанную в радиальных координатах:

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r K_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial r} \right] - g(T_e - T_a) + A(r, t),$$

$$C_a(T_a) \frac{\partial T_a}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r K_a(T_a) \frac{\partial T_a}{\partial r} \right] + g(T_e - T_a), \quad (1)$$

где C_e и K_e ; C_a и K_a — теплоемкость и теплопроводность электронной и атомной подсистем соответственно; T_e и T_a — температуры соответственно электронов и решетки; g — коэффициент, характеризующий передачу энергии от электронов решетке (коэффициент электрон-фононной связи); A — плотность энергии, переданной в электронную подсистему.

Для плотности энергии $A(r, t)$ авторами [7] было предложено следующее выражение:

$$A(r, t) = b \frac{dE}{dz} \exp\left(-\frac{(t-t_0)^2}{2t_0^2}\right) F(r), \quad (2)$$

где dE/dz — линейные неупругие потери энергии иона; t_0 — время, необходимое для того, чтобы электроны до-

стигли равновесного распределения (время свободного пробега δ -электронов средней энергии $t_0 \sim 1-5 \cdot 10^{-15}$ s); r_0 — пространственная ширина высоковозбужденной области; b — нормировочная константа, выбранная так, чтобы выполнялось соотношение

$$\int_{t=0}^{\infty} \int_{r=0}^{r_m} A(r, t) 2\pi r dr dt = dE/dz, \quad (3)$$

где r_m — максимальный пробег δ -электронов; $F(r)$ — функция пространственного распределения энергии δ -электронов в тормозящей среде, приведенная в [8].

Коэффициент электрон-фононной связи g является свободным параметром, который в свою очередь может быть выражен через другие параметры. В случае полупроводниковых материалов возможно использование двух подходов к определению g . Так, можно применять формулу, полученную в работе [9] для металлов в случае, когда температура решетки не сильно меньше температуры Дебая,

$$g = \frac{\pi^2 m_e n_e v_s^2}{6\tau_e(T_e)T_e}, \quad (4)$$

где m_e — масса электрона; n_e — концентрация электронов; v_s — скорость звука в материале мишени; τ_e — среднее время свободного пробега электронов.

Однако определение $\tau_e(T_e)$ является сложной задачей, не решенной строго до настоящего времени. В качестве первого приближения для полупроводников можно считать τ_e постоянным и равным $10^{-16}-10^{-15}$ s [10].

С другой стороны, можно выразить g через длину свободного пробега λ

$$\lambda^2 = D_e C_e / g = K_e / g. \quad (5)$$

где D_e — коэффициент термической диффузии.

В работе [7] для различных неорганических изоляторов с шириной запрещенной зоны E_g от ~ 0 до 12 eV была получена эмпирическая зависимость $\lambda(E_g)$, которую, по-видимому, можно использовать для определения g и в случае полупроводниковых материалов.

Экспериментальные зависимости решеточной теплоемкости $C_a(T_a)$ и теплопроводности $K_a(T_a)$ таких полупроводников, как Ge и InP, известны и приведены, например, в [11]. Однако следует заметить, что теплофизические параметры зависят также от степени легирования кристаллов, концентрации и типа дефектов в них.

Значения теплопроводности и теплоемкости электронной подсистемы для полупроводниковых кристаллов, строго говоря, неизвестны. Для металлов $C_e(T_e)$ и $K_e(T_e)$ можно получить из теории свободного электронного газа: удельная теплоемкость электронов металла при низких T_e является линейной функцией T_e , а при температурах, больших температуры Ферми, становится константой

$$C_e = 3/2 \cdot n_e k_B, \quad (6)$$

где k_B — постоянная Больцмана.

Теплопроводность электронного газа определяется как $K_e(T_e) = C_e(T_e) \cdot D_e(T_e)$. Для изоляторов значения $C_e(T_e)$ и $K_e(T_e)$ были получены авторами [7] в предположении, что горячие электроны в зоне проводимости изолятора ведут себя подобно горячим электронам металла. В таком случае C_e определяется выражением (6). Считая, что плотность электронов, участвующих в диффузионном распространении энергии, составляет приблизительно $5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, C_e принимается равным $1 \text{ J} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}$. K_e определяется из модели свободного электронного газа в предположении, что длина свободного пробега при электрон-электронных столкновениях минимальна и равна межатомному расстоянию. В таком случае $K_e \approx 2 \text{ J} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$. Мы полагаем, что данные значения C_e и K_e в качестве первого приближения могут быть использованы для расчета термических пиков в полупроводниковых кристаллах.

Для расчета линейных неупругих потерь энергии иона была использована формула Бете

$$dE/dz = \frac{4\pi N e^4 Z_{\text{eff}}^2}{m_e V^2} Z_b \ln \left[\frac{2m_e V^2}{I} \right], \quad (7)$$

где N — плотность атомов мишени; e — заряд электрона; Z_b — число связанных электронов на один атом мишени; Z_{eff} — эффективный заряд налетающего иона, зависящий от его энергии; I — средний потенциал ионизации атомов мишени.

Эффективный заряд иона рассчитывается по формуле из [12]

$$Z_{\text{eff}} = Z_1 (1 - \exp[-V/(V_0 Z_1^{2/3})]), \quad (8)$$

где Z_1 — атомный номер иона, $V_0 = 2\pi e^2/h$.

Для расчета среднего потенциала ионизации I в случае двухкомпонентных мишеней использовалось правило Брэгга, которое позволяет с удовлетворительной точностью выразить тормозную способность двухкомпонентной мишени через тормозные способности отдельных компонент (без учета влияния химических связей)

$$S_e(A_n B_m) = n S_e(A) + m S_e(B), \quad (9)$$

где $A_n B_m$ — двухкомпонентное вещество (n и m — число атомов), S_e — сечение электронного торможения $S_e = 1/N(dE/dz)$. С учетом формул (7) и (9) получаем

$$Z_b \ln \left[\frac{2m_e v^2}{I} \right] = Z_b^{(1)} \ln \left[\frac{2m_e v^2}{I^{(1)}} \right] + Z_b^{(2)} \ln \left[\frac{2m_e v^2}{I^{(2)}} \right], \quad (10)$$

что позволяет найти dE/dz для вещества сложного состава.

Таким образом, мы определили физические параметры и коэффициенты, необходимые для решения системы уравнений (1) для полупроводниковых материалов. Метод численного решения данной системы уравнений подробно описан в [13].

Результаты расчета

Для сравнения с полученными ранее экспериментальными результатами в случае полупроводниковых кристаллов [14–16] были рассчитаны временные и пространственные распределения температур электронной

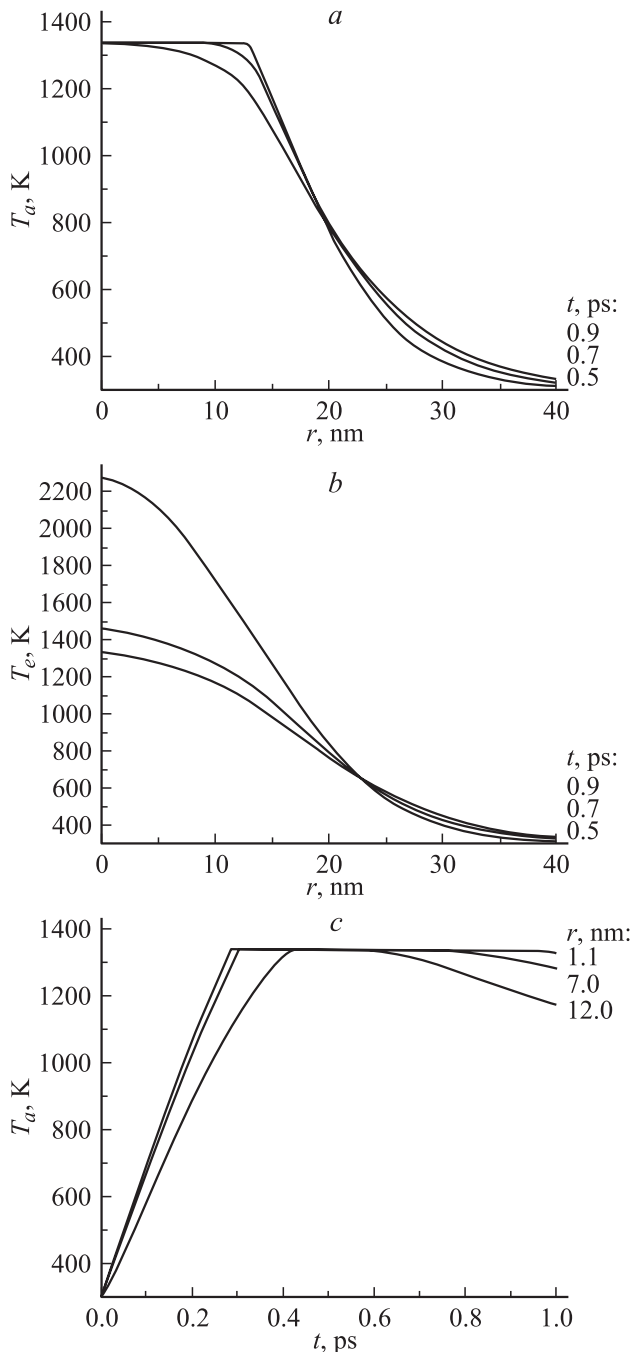


Рис. 1. Температурные зависимости для кристалла InP, облученных ионами Xe^+ с $E = 250 \text{ MeV}$, $(dE/dx)_e = 23 \text{ keV/nm}$; коэффициент g рассчитан по формуле (4). *a* — зависимость температуры решетки от расстояния до траектории иона, *b* — зависимость температуры электронов от расстояния до траектории иона, *c* — зависимость температуры решетки от времени.

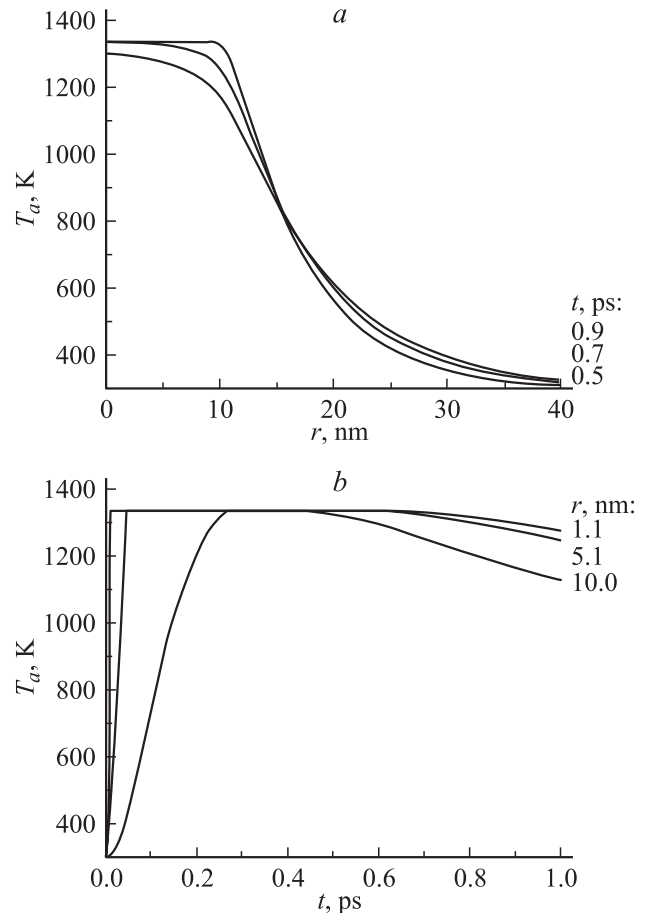


Рис. 2. То же, что на рис. 1, в случае расчета коэффициента g по формуле (5). *a* — зависимость температуры решетки от расстояния до траектории иона, *b* — зависимость температуры решетки от времени.

и атомной подсистем вблизи траекторий ионов для кристаллов InP, облученных ионами ксенона с энергиями 250 и 340 MeV, и для кристаллов германия, облученных ионами висмута с энергией 710 MeV и ионами урана с энергией 1.3 GeV. Исходная температура кристаллов полагалась равной комнатной. Неупругие потери энергии рассчитывались для иона, находящегося в кристалле на глубине $1 \mu\text{m}$. В расчетах не учитывалась скрытая теплота плавления, т.е. мы полагали, что для образования трека достаточно нагрева локальной области до температуры плавления. Основные результаты расчетов представлены на рис. 1–4.

На рис. 1 и 2 показаны температурные распределения для InP, облученного ионами Xe^+ с $E = 250 \text{ MeV}$ при разном подходе к расчету константы электрон-фононной связи g — по формулам (4) и (5) соответственно. В предположении, что $g \sim I/T_e$, максимальный радиус расплавленной области составляет примерно 12 nm , температура плавления достигается за время $\sim 3 \cdot 10^{-13} \text{ s}$ и область расплава существует около $6 \cdot 10^{-13} \text{ s}$. Если принять g не зависящим от T_e , мы

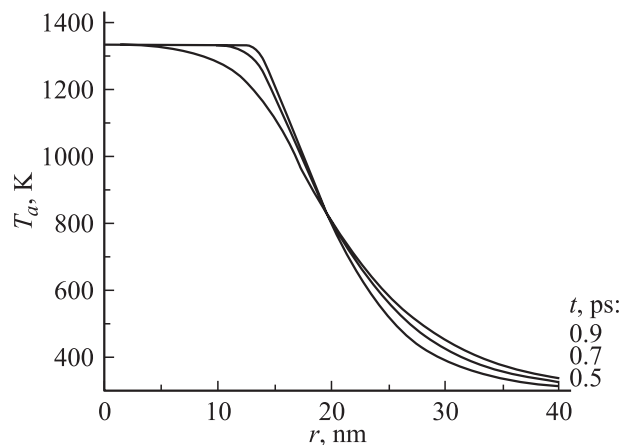


Рис. 3. Зависимость температуры решетки от расстояния до траектории иона для кристаллов InP, облученных ионами He^+ с $E = 340 \text{ MeV}$, $(dE/dx)_e = 23.9 \text{ keV/nm}$.

видим, что температура решетки достигает температуры плавления гораздо быстрее (за время $\sim 4 \cdot 10^{-14} \text{ s}$ на расстоянии от траектории иона 5 nm), а радиус расплавленной области становится равным $\sim 10 \text{ nm}$. Конечно, для временных интервалов, меньших 10^{-13} s , понятие „температура“ является некорректным. В данном случае следует дать определение „псевдотемпература“. Учитывая, что размеры определенных таким образом расплавленных областей несильно различаются, далее будем рассчитывать g исходя из (4). Для кристаллов InP, облученных ионами Xe^+ с $E = 340 \text{ MeV}$, рассчитанный максимальный радиус расплавленной области составляет $\sim 13 \text{ nm}$ (рис. 3).

Экспериментальные исследования методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) кристаллического InP, облученного ионами Xe^+ с $E = 250 \text{ MeV}$ [14], показали наличие области, содержащей непрерывные треки диаметром $7\text{--}15 \text{ nm}$, на глубине от 0.1 до $10 \mu\text{m}$. Как видно, рассчитанные размеры расплавленной области близки к выявленным экспериментально размерам треков в фосфиде индия. Некоторое превышение теоретически рассчитанных размеров треков может объясняться тем, что при расчете плотности энергии, выделенной в электронную подсистему кристалла, предполагалось, что вся энергия, переданная электронам, остается в некоторой локальной области вокруг траектории иона и идет на нагрев атомной подсистемы. Однако некоторая часть быстрых δ -электронов, обладающих заметной поперечной составляющей скорости, уходит достаточно далеко от области первоначальных возбуждений и не успевает притянуться обратно кулоновским полем оставшегося нескомпенсированного заряда благодаря высокой скорости нейтрализации в полупроводниках. Эти быстрые электроны уносят не менее трети энергии, выделенной в электронную подсистему кристалла [4].

На рис. 4 представлены рассчитанные временные зависимости температуры решетки для кристаллов Ge, облученных ионами Bi^+ с $E = 710 \text{ MeV}$ (a) и ионами U^+ с $E = 1.3 \text{ GeV}$. Как видно, максимальные радиусы расплавленных областей составляют 20 и 21 nm соответственно. В то же время исследование кристаллов Ge, облученных ионами Bi^+ и U^+ методами ПЭМ и селективного химического травления, показало наличие прерывистых треков диаметром до $10\text{--}20 \text{ nm}$ в областях от поверхности кристаллов до глубины $12\text{--}15 \mu\text{m}$ [16]. Наблюдается несколько более сильное расхождение теоретических и экспериментально полученных радиусов треков для кристаллов Ge, чем в случае кристаллов InP.

Следует заметить, что регистрируемая экспериментально максимальная плотность треков значительно (примерно на 2 порядка) меньше флюенса ионов как для InP, так и для Ge. Более того, при флюенсах, меньших некоторого порогового значения ($5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ для InP, облученного Xe с $E = 250 \text{ MeV}$), непрерывные треки вообще не формируются, а регистрируются только малые дефекты и кластеры. Это позволяет сделать вывод, что кроме критерия расплавления локальной области кристалла для формирования треков важны

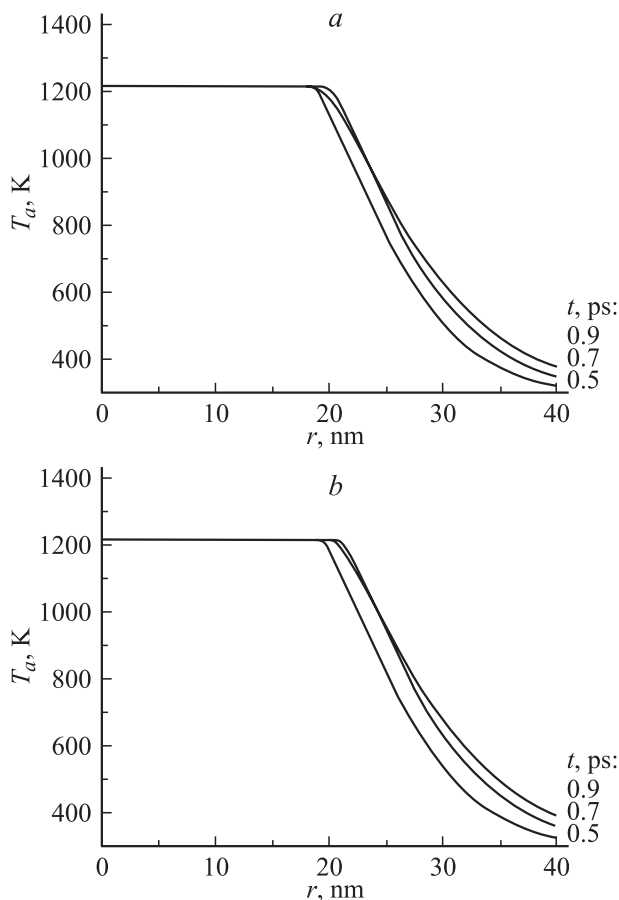


Рис. 4. Зависимости температуры решетки от расстояния до траектории иона для кристалла Ge, облученных ионами: a — Bi^+ с $E = 0.710 \text{ GeV}$, $(dE/dx)_e = 37 \text{ keV/nm}$; b — U^+ с $E = 1.3 \text{ GeV}$ $(dE/dx)_e = 42 \text{ keV/nm}$.

особенности процесса затвердевания расплава, создаваемого вокруг траектории иона.

Для таких полупроводников, как Ge, Si и соединения A^3B^5 , процесс рекристаллизации расплавленных областей, окруженных кристаллической матрицей, является очень быстрым. Следовательно, при малых флюенсах ионного облучения, когда каждое расплавленное ядро окружено совершенным кристаллом, может происходить достаточно совершенная эпитаксиальная рекристаллизация. Однако после каждой рекристаллизации в этой области остается некоторое количество дефектов структуры. При повышении флюенса ионов до значений $\sim n \cdot 10^{11} - n \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$, когда происходит многократная перекристаллизация приповерхностной области кристалла, накапливается достаточно большое количество дефектов структуры, которые, по нашему мнению, способствуют срыву эпитаксиальной рекристаллизации расплавленных областей. В этом случае регистрируются непрерывные или прерывистые треки. При достижении более высоких значений $(dE/dx)_e$ (например, как в случае облучения германия и кремния фуллеренами [17,18]) процессы трекообразования характерны каждому индивидуальному иону без предварительного облучения.

Заключение

В приближении термического пика были рассчитаны временные и пространственные зависимости температуры локальных областей вблизи траекторий ионов в кристаллах InP, облученных ионами Xe^+ с энергиями 250 и 340 MeV, и в кристаллах Ge, облученных ионами Bi^+ с энергией 0.71 GeV, и ионами U^+ с энергией 1.3 GeV. Полученные температурные профили позволили определить поперечные размеры расплавленных областей, которые достаточно хорошо соответствуют экспериментально зарегистрированным радиусам непрерывных и прерывистых треков. Это позволяет сделать вывод о том, что экспериментальные результаты для облучения полупроводниковых кристаллов [14–16] укладываются в рамки рассмотренной модели трекообразования.

Список литературы

- [1] *Fleischer R.L.* // MRS Bulletin. 1995. Vol. 20. N 12. P. 17–19.
- [2] *Bitensky I.S., Parilis E.S.* // Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res. B. 1987. Vol. 21. P. 26–29.
- [3] *Watson C.C., Tombrello T.A.* // Rad. Eff. 1983. Vol. 89. P. 263–266.
- [4] *Белый В.А., Комаров Ф.Ф.* // ЖТФ. 1998. Т. 68. С. 42–45.
- [5] *Лифшиц И.М., Каганов М.И., Танатаров Л.В.* // Атомная энергия. 1959. Т. 16. № 4. С. 391–402.
- [6] *Wang Z.G., Dufour C., Paumier E.* et al. // J. Phys. 1994. Vol. 6. P. 6733–6750.
- [7] *Toulemonde M., Dufour C., Meftah A.* et al. // Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res. B. 2000. Vol. 166–167. P. 903–912.
- [8] *Waligorski M.P.R., Hamm R.N., Katz R.* // Int. J. Radiat. Appl. Instrum. Pt D. 1986. Vol. 11. P. 309–319.
- [9] *Каганов М.И., Лифшиц И.М., Танатаров Л.В.* // ЖЭТФ. 1956. Т. 31. С. 232–237.
- [10] *Dufour C., Paumier E., Toulemonde M.* // Rad. Eff. and Defects in Solids. 1993. Vol. 126. P. 119–122.
- [11] *Landolt M., Börnstein J.* Series „Numerical data and functional relationships in science and technology“. Berlin; Heidelberg, 1982. Vol. 17a. 642 p.
- [12] *Booth W., Grant I.* // Nucl. Phys. 1965. Vol. 63. P. 481–484.
- [13] *Kamarou A.A., Malafei D.A., Shcheglik V.S.* // Proc. 2nd Intern. Conf. CFDM-98 („Finite-difference Methods: Theory and Applications“). Minsk, 1998. Vol. 2. P. 56–62.
- [14] *Herre O., Wesch W., Wendler E.* et al. // Phys. Rev. B. 1998. Vol. 58. N 8. P. 4832–4837.
- [15] *Gaiduk P.I., Komarov F.F., Tishkov V.S.* et al. // Phys. Rev. B. 2000. Vol. 61. N 23. P. 15785–15788.
- [16] *Vlasukova L.A., Komarov F.F., Gaiduk P.I.* et al. // Vacuum. In Press.
- [17] *Colder A., Marty O., Canut B.* et al. // M. Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res. B. 2001. Vol. 174. P. 491–496.
- [18] *Canut B., Bonardi N., Ramos S.M.* // M. Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res. B. 1998. Vol. 146. P. 296–301.