Доклады Академии наук СССР
1971. Том 196, № 6

УДК 537.1026 + 537.311.33 : 539.16.04 ФИЗИКА

М. А. КУМАХОВ

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИОНОВ С КРИСТАЛЛАМИ

(Представлено академиком Л. А. Арцимовичем 9 VII 1970)

В последние годы появилось большое число работ ([1]), посвященных рассеянию ионов в монокристаллах. Эти работы позволяют выяснить, являются ли примесные атомы замещающими или они занимают междоузельное положение. Здесь будет показано, что такого рода эксперименты могут дать информацию о точном месте локализации примесного или смещенного атома с точностью $\approx (0,1 \div 0,2)$ Å, поскольку каналированные ионы имеют равновесное распределение относительно атомных цепочек, формирующих канал ([2]). Например, для иона, входящего в кристалл параллельно атомной цепочке на расстоянии $\rho = \rho_1$ от нее, это распределение имеет вид

$$dn/d\rho = 2\rho/(r_0^2 - \rho_1^2), \tag{1}$$

где $r_0^2 = (\pi N d)^{-1}$; N — концентрация атомов в 1 см^3 мишени; d — расстояние между атомами.

Рассмотрим деканалирование иона точечными дефектами, когда ионный пучок направлен вдоль аксиального канала. Пусть, например, дефект расположен вблизи атомной цепочки, на расстоянии ρ_0 от нее. Предполагается, что $\rho_0 > \rho_m - r_m$; ρ_m — расстояние наименьшего сближения иона с цепочкой; r_m — наибольшее расстояние, на которое должен приблизиться ион к дефекту, чтобы покинуть канал. Тогда вероятность $W(\rho_1, x)$ деканалирования на единице длины иона, вошедшего в канал на расстоянии $\rho = \rho_1$ от цепочки, равна

$$W(\rho_{1,x}) = \begin{cases} 0, & \rho_1 > \rho_0 + r_m \approx \rho_0; \\ \dfrac{r_m^2 \varphi(x)}{r_0^2 - \rho_1^2}, & \rho \leqslant \rho_0 + r_m \approx \rho_0; \end{cases} \tag{2}$$

где $\varphi(x)$ — линейная плотность дефектов. Сечение деканалирования πr_m^2 равно

$$\pi r_m^2 = \frac{\pi z_1^2 z_2^2 e^4}{E^2} \psi^{-2}, \tag{3}$$

ψ — критический угол каналирования. При выводе (2) учитывается тот факт, что характерные значения r_m намного меньше атомных размеров. Средняя вероятность деканалирования, усредненная по всему пучку, равна

$$\langle W(x)\rangle = \frac{2}{r_0^2 - \rho_m^2} \int_{\rho_m}^{\rho_0} \rho_1 W(\rho_1, x)\, d\rho_1 = \frac{\varphi(x) r_m^2}{r_0^2 - \rho_m^2} \ln \left| \frac{r_0^2 - \rho_m^2}{r_0^2 - \rho_0^2} \right|. \tag{4}$$

Если $(\rho_0/r_0)^2 \ll 1$, а также учитывая, что для быстрых ионов $(\rho_m/r_0)^2 \ll 1$, имеем

$$\langle W(x)\rangle \approx \frac{\varphi(x) r_m^2}{r_0^4} [\rho_0^2 - \rho_m^2]. \tag{5}$$

Легко показать, что если дефект локализован в центральной части канала, например, на расстоянии l_0 от оси канала, то

$$\langle W(x)\rangle = \frac{\varphi(x)\, r_m^2}{r_0^2}\left\{\ln\left|\frac{r_0^2}{r_0^2-(\bar{d}/2)^2}\right| + 2\alpha \ln\left|\frac{\rho_{\text{кр}}}{l_0}\right|\right\}. \tag{6}$$

Здесь $\rho_{\text{кр}}$ определяется из условия

$$\pi N d\,[(\bar{d}/2)^2 + \alpha\rho_{\text{кр}}^2] = 1, \tag{7}$$

$\bar{d}$ — среднее расстояние между атомными цепочками, α^{-1} — отношение числа атомных цепочек к числу аксиальных каналов. Уход иона из канала обусловлен тепловыми колебаниями атомов и рассеянием на дефектах. Доля ионов $\chi(x)$, покинувших канал после прохождения длины x, определяется из уравнения

$$d\chi(x) = [1-\chi(x)]\left[\frac{\langle W\rangle_{\text{т}}}{d}\,dx + \langle W\rangle_g K N'(x)\,dx\right], \tag{8}$$

$N_{(x)}'$ — концентрация дефектов, $\varphi(x) = KN'(x)$. В случае (4) $K = \pi r_0^2$, в случае (6) $K = \pi r_0^2/\alpha$, $\langle W\rangle_{\text{т}}$ — вероятность деканалирования на 1 колеблющемся атоме. Ее значение равно ([3]):

$$\langle W\rangle_{\text{т}} = \frac{2}{r_0^4}\left\{\frac{u_\perp^4}{2}\left[-\exp\left(-\frac{(\rho_m-r_m)^2}{u_\perp^2}\right)-\exp\left(-\frac{(\rho_m+r_m)^2}{u_\perp^2}\right)\right]+\right.$$
$$\left.+\frac{u_\perp^3 r_m\sqrt{\pi}}{2}\left[2-\Phi\left(\frac{\rho_m-r_m}{u_\perp}\right)-\Phi\left(\frac{\rho_m+r_m}{u_\perp}\right)\right]\right\}; \tag{9}$$

$u_\perp$ — среднеквадратичная амплитуда теплового колебания атома; Φ — интеграл ошибок; $\langle W\rangle_g = \langle W(x)\rangle/\varphi(x)$. Решая (8), получаем:

$$\chi(x) = 1-[1-\chi(0)]\exp\left\{-\left[\frac{\langle W\rangle_{\text{т}}\,x}{d} + K\langle W\rangle_g\int_0^x N'(x')\,dx'\right]\right\}; \tag{10}$$

где $\chi(0) = \pi N d(\rho_m^2 + u_\perp^2)$;

В случае, когда при облучении ориентированной мишени измеряется выход y_k на глубине $x = x_1$, в интервале Δx имеем:

$$y_k = [y_1 + (\partial\chi(x)/\partial x)_{x=x_1}\Delta x]\,y_n. \tag{11}$$

Здесь

$$y_1 = (1-\chi(x))\,[\langle W(x)\rangle/\pi r_m^2 N + \langle W\rangle_{\text{т}}^{*}(\theta)/N\pi r_m^2 d],$$

y_n — нормальный выход, $y_n = \Delta\sigma(\theta) N\Delta x$, $\Delta\sigma(0) = (d\sigma/d\Omega)_{\Delta\Omega}$, $\Delta\Omega$ — угловое разрешение детектора, $d\sigma/d\Omega$ — дифференциальное сечение рассеяния, $\langle W\rangle_{\text{т}}(\theta)$ — вероятность деканалирования иона на углы $\geqslant\theta$ (обычно $\theta \gg \Psi$):

$$\langle W\rangle_{\text{т}}(\theta) = \frac{u_\perp^2 r_m^2(\theta)}{r_0^4}\exp\left(-\frac{\rho_m^2}{u_\perp^2}\right). \tag{12}$$

Полученные формулы относились к рассеянию на смещенных атомах. Когда рассматривается рассеяние на примесном атоме, формулы остаются верными, только в этом случае вместо r_m надо ставить r_{mi}, где $r_{mi}^2/r_m^2 = (z_2^2/z_i^2)^{-1}$, z_i и z_2 — атомные номера примесного атома и атома мишени. При этом $y_{ni} = \Delta\sigma_i(\theta)N_i'(x)\Delta x$, $\Delta\sigma_i(\theta)$ — сечение рассеяния на примесном атоме, $N_i'(x) = N_i'(x)_{\text{з}} + N_i'(x)_{\text{м}}$; $N_i'(x)_{\text{з}}$ — концентрация замещающих атомов, $N_i'(x)_{\text{м}}$ — концентрация междоузельных примесных атомов.

Эксперименты по обратному рассеянию с учетом полученных формул дают возможность определить концентрацию $N'(x)$ и $N_i'(x)$ смещенных атомов и примеси и одновременно получить информацию о месте локализации дефекта. Всегда имеется возможность восстановить относительную форму профиля $N'(x)$ и $N_i'(x)$, для чего достаточно промерить выход в нескольких точках, приняв за единицу отсчета выход в какой-либо точке. В случае внедренной примеси известно полное число внедренных ионов N_0'. При этом можно восстановить реальный профиль. Для этого необходимо изменить масштаб $n_i(x)$ относительного профиля в S раз, где $S = \int\limits_0^{x_{\max}} n_i(x)\,dx$, $x_{\max}$ — максимальная глубина залегания внедренной примеси. При этом по формуле (11) одновременно определяем место локализации дефекта. Интересно отметить, что при определении выхода на примеси при каналировании может иметь место эффект увеличения выхода. Действительно, легко показать, что не на очень больших глубинах, когда $\chi(x) \ll 1$, если дефект локализован в центральной части канала

$$y_{k_i} \approx \alpha^{-1}\left[\ln\left|r_0^2/[r_0^2-(\bar{d}/2)^2]\right| + 2\alpha\ln\left|\rho_{\text{кр}}/l_0\right|\right] y_{n_i}. \tag{13}$$

Если, например, $\rho_{\text{кр}}/l_0 = 10$, при $\alpha = 1$ $u_{ki}/y_{ni} \approx 5$. Этот эффект представляет интерес с двух точек зрения. С одной стороны, он может быть использован, если необходимо увеличить выход какой-либо реакции на примеси, например, характеристического излучения или числа ядерных реакций и т. д. С другой стороны, наличие этого эффекта в эксперименте свидетельствует о том, что примесь локализована в центральной части канала. Измеряя y_n, y_k и определив $N'(x)$, можно найти по формуле (11) число радиационных нарушений, произведенных одним вбитым ионом. Это дает возможность решить одну из наиболее важных и трудных задач радиационной физики твердого тела. Эксперименты могут дать ответ на вопрос о том, являются кластеры вакансионными областями или они состоят из каких-то сложных комплексов. Это связано с тем, что выход в том или в другом случае будет разный. Полученные результаты могут быть использованы в физике сверхтонких взаимодействий, где точное определение местоположения примесного атома является важной проблемой. Это краткое перечисление показывает, что эксперименты с использованием эффекта каналирования являются новым мощным методом исследования реальных дефектных кристаллов.

Автор признателен О. Б. Фирсову за полезное обсуждение работы.

Научно-исследовательский институт ядерной физики
Московского государственного университета
им. М. В. Ломоносова

Поступило
8 VII 1970

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] Proceedings of the Chalk River Conference; Canad. J. Phys., 46, № 6 (1968). [2] J. Lindhard, Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk., 34, № 14 (1965) (пер. Е. С. Машковой, УФН, 99, 249 (1969)). [3] M. A. Kumakhov, Phys. Lett., 33 A, 133 (1970).