

В. М. ЛЕНЧЕНКО, Ю. З. АКИЛОВ

РАСЧЕТ СТОЛКНОВЕНИЙ И ПРОБЕГОВ АТОМОВ В КРИСТАЛЛАХ

(Представлено академиком Л. А. Арцимовичем 6 IX 1971)

Из краткого полукачественного описания используемой в работах ⁽¹⁻³⁾ методики для расчетов последовательных парных столкновений в кристаллах нельзя точно узнать, как определялись траектории сталкивающихся атомов и параметры последующих столкновений, что не позволяет воспроизвести подобные расчеты. Ясно только, что в ⁽¹⁻³⁾ неверно определялось положение точки пересечения асимптот разлетающихся атомов (для необрезанных потенциалов ее положение давалось расходящимся интегралом).

В настоящей работе нами точно решена задача определения асимптот к траекториям сталкивающихся атомов и, кроме того, найдены рекуррентные соотношения, определяющие последовательные парные столкновения в кристаллах.

На основании классической теории столкновения частиц в лабораторной системе координат получены следующие уравнения для асимптот разлетающихся частиц после столкновения:

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{b}_1 + \mathbf{v}_1 t, \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{b}_2 + \mathbf{v}_2 t. \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{v}_1$ и $\mathbf{v}_2$ — скорости частиц после столкновения, определяемые по обычным формулам, вытекающим из законов сохранения энергии и импульса, t — время, $\mathbf{b}_1$ и $\mathbf{b}_2$ — векторы смещения асимптот, вычисляемые с помощью уравнений

$$\mathbf{b}_1 = 2\mu_1(\mathbf{v}_0\tau + \rho_0) + (\mu_2 - \mu_1)\rho_0^*, \quad (2)$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\mu_1(\mathbf{v}_0\tau + \rho_0 - \rho_0^*),$$

где τ — момент наибольшего сближения атомов,

$$\tau = \lim_{r \rightarrow \infty} \left[\int_{r_0}^r \frac{dr'}{v_0 R(r')} - \frac{\sqrt{r^2 - \rho_0^2}}{v_0} \right], \quad (3)$$

$$\rho_0^* = \left(\rho_0 - \rho_0 \frac{v_0}{v_0} \operatorname{ctg} \varphi \right), \quad (4)$$

$$\varphi = \int_{r_0}^{\infty} \frac{\rho_0 dr}{r^2 R(r)}, \quad (5)$$

$$R(r) = \sqrt{1 - \frac{\rho_0^2}{r^2} - \frac{U(r)}{E_r}}; \quad (6)$$

μ_1, μ_2 — относительные массы частиц; $E_r, U(r)$ — их относительная энергия и потенциал взаимодействия; v_0, ρ_0 — скорость и параметр столкновения налетающей частицы соответственно.

Уравнения (1) — (6) удобны для расчетов столкновений и пробегов ионов и атомов в кристаллах. Знание структуры последних позволяет точ-

те-Карло в соответствии с дебаевским спектром колебаний атомов. Потенциалы взаимодействия выбираются так же, как и в ⁽⁵⁾.

Для иллюстрации возможностей описанной выше методики нами рассчитан на ЭВМ профиль внедрения ионов Kr^{85} с энергией $E = 40$ кэв в монокристалл Al в направлении $\langle 100 \rangle$. На грани (100) монокристалла Al выбиралась элементарная поверхностная ячейка, которая бомбардировалась параллельным пучком ионов Kr^{85} . На рис. 1 приведены результаты расчетов (3—5) и экспериментальные кривые ⁽⁶⁾. Незначительное расхождение теоретической кривой 4 с экспериментальной 1 может быть объяснено забиванием каналов кристалла внедряемыми и выбиваемыми атомами при продолжительной бомбардировке. На рис. 1, 2, 5 для сравнения приведены экспериментальная кривая для Al_2O_3 (2) и (5) — рассчитанная для бесструктурного Al по методу Монте-Карло ⁽⁵⁾. Различие между этими двумя кривыми можно объяснить, если учесть, что кислород в Al_2O_3 обладает меньшей тормозной способностью для ионов Kr^{85} , чем Al.

Мы провели также исследование внедрения ионов B^{10} в монокристалл Si, рассчитав профили легирования для разных энергий ионов (рис. 2), направлений внедрения и температур кристалла (рис. 3). Представленные здесь профили внедренных ионов соответствуют малым потокам ионов ($< 10^{13}$ ионов/см²), когда нарушения структуры кристалла будут малыми и поэтому не отразятся существенно на проникновении ионов. На практике обычно имеют дело с большими потоками. В этом случае часть ионов будет проходить через нарушенные области кристалла, создаваемые быстрыми атомами отдачи. На рис. 4 показано распределение внедренных ионов B^{10} с энергией $E = 30$ кэв в $\langle 110 \rangle$ Si при $T = 300^\circ$ К для дозы облучения $N \approx 5 \cdot 10^{14}$ ионов/см². В этом случае часть ионов (соответствующая $N \approx 10^{13}$ ионов/см²) рассчитывалась, как движущаяся по идеальной решетке, проникновение же остальных ионов рассчитывалось по методу Монте-Карло ⁽²⁾ (для разупорядоченной решетки). Распределения аналогичной формы наблюдаются в экспериментах ^(7, 8).

В заключение авторы выражают глубокую признательность О. Б. Фирсову, В. С. Вавилову, В. А. Молчанову и Е. С. Машковой за обсуждение и интерес к работе.

Институт ядерной физики
Академии наук УзССР
пос. Улугбек Ташкентской обл.

Поступило
11 I 1971

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ M. T. Robinson, O. S. Oen, Phys. Rev., **132**, 2385 (1963). ² J. R. Beeler, J. Appl. Phys., **35**, 2226 (1964). ³ J. R. Beeler, Phys. Rev., **150**, 470 (1966). ⁴ Л. М. Кишиневский, Изв. АН СССР, сер. физ., **26**, 11 (1962). ⁵ Т. С. Пугачева, В. М. Ленченко, Ю. З. Акилов, Расчет пробега атомов с энергиями до 50 кэв в твердых телах, ВИНТИ, 2862-71 Деп. от 3 мая 1971 г. ⁶ G. R. Piercy, M. McCargo, F. Brown, J. A. Davies, Canad. J. Phys., **42**, 1116 (1964). ⁷ J. W. Mayer, L. Eriksson, J. A. Davies, Ion Implantation in Semiconductors Silicon and Germanium, London, 1970. ⁸ G. Dearnaley, Ion Bombardment and Implantation, In: Rep. Progr. Phys., **32**, № 4, 405 (1969).