

О ВОЗМОЖНОСТИ ТОЧНОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПОЛОЖЕНИЯ ПРИМЕСНОГО АТОМА С ПОМОЩЬЮ ЭФФЕКТА КАНАЛИРОВАНИЯ

(Представлено академиком Л. А. Арцимовичем 3 IX 1971)

Как известно ^(1, 2), эффект каналирования находит широкое применение в физике твердого тела, ядерной и атомной физике. В последнее время каналирование ионов было использовано для изучения реальных дефектных кристаллов ⁽³⁾. Вследствие перераспределения потока каналированных ионов в поперечной плоскости расстояние ионов на дефектах решетки имеет ряд особенностей. Эти особенности дают возможность получить детальную информацию о некоторых свойствах дефектных кристаллов, которую, по-видимому, невозможно получить в настоящее время другим путем. В то же время без учета этих особенностей, как будет показано, обычная интерпретация экспериментов по обратному рассеянию оказывается во многих случаях ошибочной.

Рассмотрим рассеяние каналированного иона на примесном атоме. Если примесный атом локализован на некотором расстоянии l_0 от оси канала, то, как было показано в ⁽⁴⁾, отношение выхода при каналировании y_k к выходу при неориентированном облучении y_n

$$\frac{y_k}{y_n} = \ln \left| \frac{r_0^2 - \rho_{\min}^2}{r_0^2 - (1/2\bar{d})^2} \right| + 2 \ln \left| \frac{\rho_{\text{кр}}}{l_0} \right| + \frac{\rho_{\min}^2}{r_0^2}, \quad (1)$$

где ρ_{\min} — расстояние наименьшего сближения иона с атомной цепочкой, $r_0^2 = (\pi N d)^{-1}$, N — плотность атомов мишени в 1 см³; d — расстояние между атомами; $1/2\bar{d}$ — среднее расстояние между атомными цепочками; $\rho_{\text{кр}}$ — радиус, ограничивающий центральную часть канала. Когда центральная часть канала аппроксимируется окружностью

$$r_0^2 = (1/2\bar{d})^2 + \alpha \rho_{\text{кр}}^2, \quad (2)$$

α — отношение числа осевых каналов к числу атомных цепочек, формирующих канал; в кремнии, например, $\alpha = 1/2$ в направлении $\langle 110 \rangle$, $\alpha = 1$ в направлении $\langle 100 \rangle$; $\alpha = 2$ в направлении $\langle 111 \rangle$. Площадь, приходящаяся на один аксиальный канал, очевидно, равна

$$S_0 = \pi r_0^2 \alpha^{-1}. \quad (3)$$

Пользуясь соотношениями (2), (3), формулу (1) можно переписать

$$\frac{y_k}{y_n} = \ln \left| \frac{S_0 - S_{\text{нек}}}{\pi l_0^2} \right| + \frac{\rho_{\min}^2}{r_0^2}, \quad (4)$$

где $S_{\text{нек}} = \pi \rho_{\min}^2 \alpha^{-1}$.

Так как эквипотенциальная поверхность в действительности не является окружностью (см., например, рис. 1), то формулу (4) правильнее записать как

$$\frac{y_k}{y_n} = \ln \left| \frac{S_0 - S_{\text{нек}}}{S_{l_0}} \right| + \frac{\rho_{\min}^2}{r_0^2}, \quad (5)$$

где S_{l_0} — эквипотенциальная поверхность, на границе которой локализован примесный атом. При учете деканалирования ионов (5) можно записать

$$\frac{y_{\text{к}}}{y_{\text{н}}} = (1 - \chi(z)) \ln \left| \frac{S_0 - S_{\text{нек}}}{S_{l_0}} \right| + \frac{\rho_{\text{мин}}^2}{r_0^2} + \frac{\partial \chi(z)}{\partial z} \Delta z, \quad (6)$$

где $\chi(z)$ — доля ионов, вышедших из канала после прохождения длины z ; Δz — рассматриваемый интервал глубин. Вблизи поверхности, когда $\chi(z) \ll 1$, (6) переходит в (5).

Ионные пучки обычно имеют расходимость порядка $0^\circ, 1$. Учтем этот фактор. Малая расходимость достигается тем, что ионы пропускают через диафрагму. Поэтому можно принять, что угловое распределение ионов является изотропным внутри среднего угла расходимости θ :

$$dn/d\theta = 2\theta/\bar{\theta}^2. \quad (7)$$

Потенциал в центральной части канала $U(x)$ можно принять гармоническим: $U(x) = Ax^2$. Коэффициент A можно получить разложением стандартного потенциала Линдхарда ⁽⁵⁾ в ряд Тейлора. Здесь x отсчитывается от оси канала, $x^2 = x_1^2 + x_2^2$; $x_{1,2}$ — одномерные величины.

В гармоническом приближении, если расходимость так мала, что $E\bar{\theta}^2/(Al_0^2) \ll 1$, получаем

$$\frac{y_{\text{к}}}{y_{\text{н}}} = \frac{\bar{N}(z)_{\text{ин}}}{N(z)_i} (1 - \chi(z)) \left\{ \ln \left| \frac{S_0 - S_{\text{нек}}}{S_{l_0}} \right| + \frac{E\bar{\theta}^2}{Al_0^2} \right\} + \frac{\rho_{\text{мин}}^2}{r_0^2} + \frac{\partial \chi(z)}{\partial z} \Delta z, \quad (8)$$

где $\bar{N}(z)_{\text{ин}}$ — концентрация примесных атомов, находящихся в междоузельном положении в данном кристаллографическом направлении, вдоль которого направлен ионный пучок; $N(z)_i$ — полная концентрация примесных атомов, включая и атомы, находящиеся в замещающем положении.

Потенциал в канале таков, что некоторое изменение $\Delta U = \frac{\partial U}{\partial x} \Delta x$ связано с весьма незначительным интервалом Δx вблизи цепочки атомов, в то время как такое же изменение ΔU связано с большим интервалом Δx вблизи оси канала. Поэтому можно ввести такое расстояние $\bar{\rho}_{\text{кр}}$, что $Ax^2 = A\bar{\rho}_{\text{кр}}^2 \gg E\bar{\theta}^2$. Это означает, что при $x > \bar{\rho}_{\text{кр}}$ можно не учитывать перераспределение потока, связанное с расходимостью ионного пучка. При этом без учета деканалирования, когда $\chi(z) = 0$, получаем

$$\frac{y_{\text{к}}}{y_{\text{н}}} = \frac{\bar{N}(z)_{\text{ин}}}{N(z)_i} \left[\ln \left| \frac{S_0 - S_{\text{нек}}}{\pi \bar{x}_{\text{мин}}^2} \right| + \frac{\bar{x}_{\text{мин}}^2}{\bar{\rho}_{\text{кр}}^2} \right] + \frac{\rho_{\text{мин}}^2}{r_0^2}, \quad (9)$$

где $\bar{x}_{\text{мин}}^2 = E\bar{\theta}^2/A$. Формула (9) получена в предположении, что $l_0 < \bar{x}_{\text{мин}}$, т. е. для случая, когда примесный атом локализован или в центре канала или во всяком случае настолько близко к оси канала, что $l_0 < \bar{x}_{\text{мин}}$. Если $l_0 > \bar{x}_{\text{мин}}$, т. е. $S_{l_0} > \pi \bar{x}_{\text{мин}}^2$, в формуле (9) $\pi \bar{x}_{\text{мин}}^2$ надо заменить на S_{l_0} . Для простых оценок можно иногда считать, что $U(x) = 0$ при $x < \bar{\rho}_{\text{кр}}$. При этом $\bar{x}_{\text{мин}}/\bar{\rho}_{\text{кр}} = 1$, так что

$$\frac{y_{\text{к}}}{y_{\text{н}}} = \frac{\bar{N}(z)_{\text{ин}}}{N(z)_i} \left[\ln \left| \frac{S_0 - S_{\text{нек}}}{\pi \bar{x}_{\text{мин}}^2} \right| + 1 \right] + \frac{\rho_{\text{мин}}^2}{r_0^2}, \quad (10)$$

так как обычно $S_0 \gg S_{\text{нек}}$ и $\rho_{\text{мин}}^2/r_0^2 \ll 1$,

$$\frac{y_{\text{к}}}{y_{\text{н}}} \approx \frac{\bar{N}(z)_{\text{ин}}}{N(z)_i} \left[\ln \left| \frac{S_0}{\pi \bar{x}_{\text{мин}}^2} \right| + 1 \right]. \quad (11)$$

Очевидно, когда $S_{l_0} > \pi \bar{x}_{\text{мин}}^2$, в (11) $\pi \bar{x}_{\text{мин}}^2$ заменяется на S_{l_0} .

Рассмотрим теперь случай, когда примесные атомы локализованы на разных расстояниях от центра канала. Пусть, например, один атом локализован на границе эквипотенциальной поверхности S_{l_0} , а с атомов — на

$S_{l_{02}}$. Предположим, что $S_{l_{01}} > S_{l_{02}}$. Без учета расходимости ионного пучка при этом получаем

$$\frac{y_K}{y_H} = \frac{N(z)_{in}}{N(z)_i} \left[\ln \left| \frac{S_0 - S_{нек}}{S_{l_{01}}} \right| + \frac{c}{c+1} \ln \left| \frac{S_{l_{01}}}{S_{l_{02}}} \right| \right] + \frac{\rho_{min}^2}{r_0^2}. \quad (12)$$

Если l_{01} близка к атомной цепочке, то $S_{l_{01}} = S_0 - \pi l_{01}^2 \alpha^{-1}$. При учете расходимости ионного пучка в приближении (9) имеем

$$\frac{y_K}{y_H} = \frac{N(z)_{in}}{N(z)_i} \left[\ln \left| \frac{S_0 - S_{нек}}{S_{l_{01}}} \right| + \frac{c}{c+1} \frac{\bar{x}_{min}^2}{\bar{\rho}_{кр}^2} + \frac{c}{c+1} \ln \left| \frac{S_{l_{01}}}{S_{l_{02}}} \right| \right] + \frac{\rho_{min}^2}{r_0^2}. \quad (13)$$

Если примесные атомы находятся на разных расстояниях, то при большой расходимости ионного пучка, когда все они оказываются внутри круга $\pi \bar{\rho}_{кр}^2 \approx \pi \bar{x}_{min}^2$, получаем формулу (11).

Рассмотрим теперь случай, когда внешний угол φ_e падения ионного пучка на кристалл по отношению к оси канала не равен нулю.

Сделаем простые аналитические оценки. В приближении (9) без учета расходимости ионного пучка получаем

$$\frac{y_K}{y_H} \approx \frac{N(z)_{in}}{N(z)_i} \left[\ln \left| \frac{S_0}{S_{l_{01}} - \pi E \varphi_e^2 / A} \right| \right] + \frac{\rho_{min}^2 (\varphi_e)}{r_0^2}, \quad E \varphi_e^2 = A x_{min}^2, \quad (14)$$

когда атом локализован на границе поверхности $S_{l_{01}}$. Здесь $S_{нек} = \pi \rho_{min}^2 (\varphi_e) \alpha^{-1}$; в приближении стандартного потенциала Линхарда

$$\rho_{min}^2 (\varphi_e) = 3a^2 / (\exp [2 - (1 - E \varphi_e^2 / (E \psi^2))] - 1), \quad (15)$$

ψ — критический угол каналирования; a — параметр экранирования.

Уравнение (14) приводит к интересной особенности: максимальный выход $y_{K \max}$ имеет место при некотором $\varphi_e = \varphi_e(l_0)$, который зависит от положения примесного атома. Угол, при котором имеет место максимальный выход, приближенно можно определить по формуле *

$$\varphi_e^2(l_0) \approx A l_0^2 / E.$$

Оценим теперь полуширину пика при увеличении выхода. Пусть пучок имеет некоторую расходимость $\bar{\theta}$ такую, что примесный атом, находящийся на некотором расстоянии l_0 от оси канала, оказывается внутри круга $S(\bar{\theta}) = \pi \bar{x}_{min}^2$, где $\bar{x}_{min}^2 = E \bar{\theta}^2 / A$. Значение $\varphi_{1/2}$ тогда можно найти как

$$\begin{aligned} \varphi_{1/2}^2 &= \frac{\psi^2}{2} \ln \left| 1 + \frac{V \bar{3} a}{b - \left[\frac{1}{\pi} \exp (\Delta_2 - 1/2 \Delta_1) (S_0 S(\bar{\theta}))^{1/2} \right]^{1/2}} \right| \approx \\ &\approx \frac{\psi^2}{2} \frac{V \bar{3} a}{b - \left[\frac{1}{\pi} \exp (\Delta_2 - 1/2 \Delta_1) (S_0 S(\bar{\theta}))^{1/2} \right]^{1/2}}, \end{aligned} \quad (16)$$

$\Delta_1 = (\bar{x}_{min} / \bar{\rho}_{кр})^2$, $\Delta_2 = (x_{min} / \bar{\rho}_{кр})^2$, $b = (S_0 / \pi)^{1/2}$, b — расстояние от оси канала до атомного ряда. Если $S_{l_0} > S(\bar{\theta})$, т. е. $l_0 > \bar{x}_{min}$, то $S(\bar{\theta})$ в (16) заменяется на S_{l_0} . Типичные значения $\bar{\theta}$ таковы, что

$$b > \left[\frac{\exp (\Delta_2 - 1/2 \Delta_1)}{\pi} (S_0 S(\bar{\theta}))^{1/2} \right]^{1/2}.$$

При этом

$$\varphi_{1/2}^2 \approx 1/2 \psi^2 V \bar{3} a / b, \quad \varphi_{1/2} \approx \psi (a/b)^{1/2}. \quad (17)$$

Сравнение (17) с экспериментами ^(6, 7) дало хорошее согласие.

Недавно ^(6, 7) наряду с увеличением выхода при аксиальном каналировании наблюдалось также увеличение выхода при плоскостном каналировании. Увеличение выхода при аксиальном каналировании наблюдалось

* Очевидно, при этом в угловом распределении конармированных ионов будет наблюдаться двойной максимум.

еще раньше (^{8, 9}). Увеличение выхода при плоскостном каналировании также можно объяснить перераспределением потока ионов внутри канала.

Легко показать, что отношение $\gamma(y)$ потока ионов в канале в некоторой точке y к потоку при произвольном облучении в плоскости равно

$$\gamma(y) = \frac{2}{\pi} \ln \left| \frac{\dot{y}}{y} + \sqrt{\left(\frac{\dot{y}}{y}\right)^2 - 1} \right|, \quad (18)$$

т. е. при малых y $\gamma(y) > 1$, $\dot{y} = l - \rho_{\min}$, $l = 1/2 d_p$. Именно поэтому имеет место эффект увеличения выхода в плоскости. Соответствующее от-

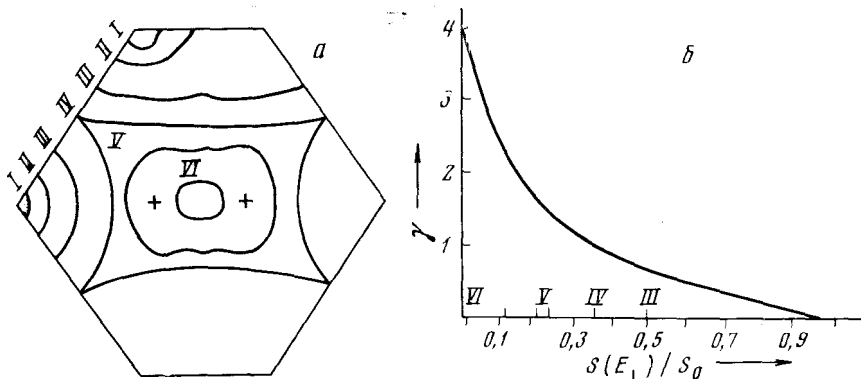


Рис. 1. а — эквипотенциальные поверхности в аксиальном канале в Si в направлении $\langle 110 \rangle$; крестик означает тетраэдральное междоузлие в этом направлении; б — увеличение потока ионов в канале $\langle 110 \rangle$ в Si

ношение потоков при аксиальном каналировании на границе некоторой эквипотенциальной поверхности S равно (^{4, 7})

$$\gamma(S) = \ln |S_0/S|. \quad (19)$$

Как видно из рис. 1, в тех случаях, когда примесные атомы находятся в тетраэдральных положениях, коэффициент увеличения выхода равен 2,1. Это означает, что при интерпретации ранних экспериментов по обратному рассеянию, когда не учитывалось перераспределение потока ионов при определении числа атомов, находящихся в междоузельном положении, к числу атомов, находящихся в замещающем состоянии, была допущена ошибка, равная коэффициенту увеличения выхода.

Проведенный анализ позволяет провести количественную интерпретацию экспериментов по обратному рассеянию с использованием эффекта каналирования. Анализ показывает, что эксперименты дают возможность получить информацию о точном положении примесного атома, находящегося в междоузельном положении. При этом удастся также правильно найти отношение числа атомов, находящихся в междоузельном положении, к числу атомов, находящихся в замещающем состоянии.

В заключение автор выражает искреннюю благодарность О. Б. Фирсову за интерес к работе и полезное обсуждение.

Научно-исследовательский институт
ядерной физики

Московского государственного университета
им. М. В. Ломоносова

Поступило
21 VIII 1971

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ Proc. Intern. Conf. Canad. J. Phys., 46, № 6 (1968).
- ² Proc. Intern. Conf. Atomic Collision Phenomena in Solids, Ed. by D. W. Palmer, M. W. Thomson, P. D. Townsend, North-Holl., 1970.
- ³ J. W. Mayer, L. Eriksson, J. A. Davies, Ion Implantation in Semiconductors, 1970.
- ⁴ М. А. Кумахов, Phys. Letters, 32a, 538 (1970); ДАН, 196, 1300 (1971); Препринт Л-122178, Н.-и. инст. ядерн. физики, МГУ, 1970.
- ⁵ J. Lindhard, Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk., 34, № 14 (1965).
- ⁶ B. Domeij, G. Fladda, N. G. E. Johansson, Radiation Effects, 6, 155 (1970).
- ⁷ J. U. Andersen, O. Andreassen et al., Radiation Effects, 7, 25 (1971).
- ⁸ Г. А. Ифиров, Г. П. Похил, А. Ф. Тулинов, Письма ЖЭТФ, 8, 250 (1967).
- ⁹ J. U. Andersen, E. Uggerhøj, W. M. Gibson, Proc. Conf. on Appl. of Ion Beams to Semicond. Technology, Grenoble, 1967.