

# ПРОСТРАНСТВЕННОЕ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТОКА ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

*М. А. Кумахов*

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение . . . . .	427
2. Эффект пространственного перераспределения потока заряженных частиц при аксиальном каналировании . . . . .	429
а) Основные предположения, которые используются при интерпретации экспериментов по определению местоположения примесного атома (429). б) Статистическое равновесное распределение при аксиальном каналировании (430). в) Время установления равновесного распределения (431). г) Распределение потока ионов в аксиальном канале (434). д) Зависимость потока от угла падения ионного пучка на кристалл (435). е) Многократное рассеяние и его влияние на перераспределение потока ионов (437). ж) Распределение потока ионов на малых глубинах (442). з) Расщепление углового распределения каналированных ионов и появление многократных пиков (445).	
3. Эффект пространственного перераспределения потока ионов при плоскостном каналировании . . . . .	448
а) Поток ионов в плоскостном канале (448). б) Многократное рассеяние каналированных ионов при плоскостном каналировании (450).	
4. Каналирование тяжелых ионов . . . . .	451
а) О некоторых особенностях каналирования тяжелых ионов (451). б) Пространственное распределение тяжелых каналированных ионов (452).	
5. Эксперименты по определению местоположения примесного атома . . . . .	454
а) Основные факторы, влияющие на местоположение примесного атома (454). б) Использование эффекта перераспределения потока для точного определения местоположения примесного атома (455). в) Определение местоположения бора в кремнии (460).	
6. Заключение . . . . .	460
Цитированная литература . . . . .	461

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Эксперименты, которые проводились в последние десять — пятнадцать лет, выявили целый ряд особенностей при взаимодействии заряженных частиц с кристаллической решеткой. Упорядоченность решетки приводит к ориентационным эффектам.

Первый из них, по-видимому, наблюдали Бредов с сотрудниками<sup>1</sup> и Дэвис и др.<sup>2</sup>, обнаружившие аномально большие пробеги ионов с энергией в несколько кэв, в кристаллических мишенях. Для определения пробегов ионов авторы<sup>1</sup> использовали метод меченых атомов. Им удалось показать, что эффект аномального прохождения обусловлен не диффузией, а связан с начальной кинетической энергией ионов.

Несколько другой эффект наблюдал Венер<sup>3</sup>, обнаруживший анизотропию распыления монокристаллических мишеней, бомбардируемых

© Главная редакция физико-математической литературы издательства «Наука», «Успехи физических наук», 1975 г.

тяжелыми ионами. Первая интерпретация этого эффекта принадлежит Силсби <sup>4</sup> (теория фокусировки атомных столкновений в кристаллах).

Рол с сотрудниками <sup>5</sup>, Молчанов и Тельковский <sup>6</sup> установили существование резкой зависимости выхода распыленных атомов от угла падения ионов на монокристалл. В работах Машковой и др. <sup>7</sup> было также установлено, что коэффициент ионно-электронной эмиссии резко меняется, когда ионный пучок идет вдоль плотноупакованных атомных рядов. Теория этих явлений была предложена Одинцовым <sup>8</sup> и Мартыненко <sup>9</sup>.

Несколько позже Робинсон и Оен <sup>10</sup> в результате прямого моделирования на ЭВМ процесса прохождения ионов в решетке меди пришли к заключению, что ион, траектория которого проходит в кристалле под малым углом к направлению плотной упаковки атомов кристалла, имеет значительно больший пробег, чем ион при хаотическом направлении движения. Робинсон и Оен назвали это явление каналированием. Несколько групп экспериментаторов независимо подтвердили существование каналирования <sup>11-13</sup>. Эксперименты Бредова и др. <sup>1</sup> и Дэвиса и др. <sup>2</sup>, очевидно, имеют прямое отношение к каналированию.

Другой эффект, названный эффектом тени (или блокировки), был обнаружен и исследован Домеем и Берквистом <sup>14</sup>, Тулиновым с сотрудниками <sup>15</sup>, Хеммелом и Голандом <sup>16</sup>. В этих работах показано, что из-за упорядоченности решетки выход заряженных частиц из кристалла вдоль атомных рядов и плоскостей становится невозможным, вследствие чего на фотопластинках, фиксирующих интенсивность выхода частиц, появляются тени атомных рядов и плоскостей. Расчет формы тени для потенциала Фирсова был проведен Мартыненко <sup>9</sup>. В работе Аграновича и др. <sup>17</sup> проведен расчет тени с учетом теплового колебания атомов. Тулиновым <sup>15</sup> проведен расчет тени с учетом экранирования ядра электронами.

Основные представления теории эффекта каналирования и тени были сформулированы в работах Линдхарда <sup>18, 19</sup>. Линдхард ввел представление об атомных цепочках и плоскостях, заменив потенциалы отдельных атомов потенциалами непрерывных атомных цепочек и плоскостей. Линдхарду удалось получить значение критического угла  $\psi_c$ , в пределах которого может наблюдаться каналирование. При расчете конкретных параметров в теории Линдхарда используется статистическое описание.

Для тяжелых частиц (протонов,  $\alpha$ -частиц и более тяжелых ионов) классическая теория Линдхарда оказывается вполне удовлетворительной <sup>21</sup>. Она дает возможность объяснить любой из до сих пор проведенных экспериментов. Однако для описания каналирования легких частиц, электронов и позитронов, по-видимому, во многих случаях необходимо квантовое рассмотрение.

Каган и Кононец <sup>20</sup> использовали аппарат матрицы плотности для описания каналирования и получили зависимость выхода резерфордовского рассеяния от угла падения.

В дальнейшем в теории были учтены неупругие процессы. Оказалось, что на глубинах  $>1000 \text{ \AA}$  недиагональные члены матрицы плотности исчезают и движение ионов в канале можно описывать уравнением Больцмановского типа. Теория предсказывает дифракционные эффекты вблизи поверхности кристалла. В рамках этого формализма, в частности, удастся вычислить функцию деканалирования и энергетический спектр. Этот подход удобен тем, что позволяет получить распределение частиц по сечению канала.

Квантовая теория <sup>20</sup> является сейчас, по-видимому, наиболее строгой и законченной.

Рассеяние в тонком кристалле с квантовой точки зрения было изучено в работах Калашиникова, Рязанова, Коптелова, Чуховского <sup>22</sup>.

С учетом экранирования соседних ядер атомной цепочки им удалось получить выражение для дифференциального сечения упругого рассеяния.

Взаимоотношение квантового и классического подходов исследовалось Ньютоном и Чаддертоном<sup>23</sup>. Они считают, что квантовый подход должен быть дифракционным, так как необходимо рассматривать плоскую волну на входе в кристалл и совокупность блоховских волн внутри него. Более подробно об этом см. работу Чаддертона<sup>121</sup>.

В последние годы ориентационные эффекты использовались в большом количестве экспериментов<sup>24, 25</sup> для изучения динамики радиационного повреждения кристаллов, для определения местоположения примесного атома, а также в атомной и ядерной физике. Каналирование ионов сопровождается новым физическим явлением — эффектом пространственного перераспределения потока заряженных частиц в кристаллической решетке. Исследованию этого эффекта и возможностям его использования в физике посвящена данная работа.

## 2. ЭФФЕКТ ПРОСТРАНСТВЕННОГО ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОТОКА ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ ПРИ АКСИАЛЬНОМ КАНАЛИРОВАНИИ

а) Основные предположения, которые используются при интерпретации экспериментов по определению местоположения примесного атома. Когда пучок ионов падает на кристалл параллельно какой-либо кристаллографической оси, пучок разделяется на две компоненты: каналированную и хаотическую, т. е. неканалированную. Канализованные ионы не подходят к цепочке атомов ближе некоторого расстояния  $r_{\min}$ . Согласно Линдхарду,  $r_{\min}^2 = u_{\perp}^2 + a^2$ , где  $u_{\perp}$  — амплитуда тепловых колебаний атома, перпендикулярная рассматриваемой цепочке;  $a$  — параметр экранирования. Доля ионов, которая не входит в канал, равна  $\pi r_{\min}^2 N d$ , где  $N d$  — число цепочек, проходящихся на  $1 \text{ см}^2$  поверхности, перпендикулярной направлению ионного пучка;  $N$  — концентрация атомов в  $1 \text{ см}^3$ ;  $d$  — расстояние между атомами в цепочке.

Большинство физических процессов, например, резерфордовское рассеяние на больших углах, ядерные реакции, образование характеристического излучения из внутренних оболочек атома и т. д., требуют малых прицельных параметров, по крайней мере меньших, чем  $r_{\min}$ . По порядку величины  $r_{\min} \sim 0,1 \text{ Å}$ , а все процессы требуют прицельных параметров на один — два порядка меньше. На этом факте и основано использование каналирования для определения местоположения примесного атома.

Рассмотрим, например, случай резерфордовского рассеяния. Сначала производится бомбардировка неориентированной мишени. В течение определенного времени регистрируют на детекторе число частиц, рассеиваемых в некоторый телесный угол, который определяется положением детектора относительно мишени и угловым разрешением детектора. При этом проводится регистрация тех частиц, которые рассеиваются примесными атомами, а не атомами матрицы. Это всегда можно сделать, если масса примесного атома больше массы атома матрицы, так как в этом случае энергия частиц, рассеянных на примесных атомах, больше, чем энергия частиц, рассеянных на атомах матрицы. Поэтому, настраивая детектор на определенный энергетический интервал, можно отсеять частицы, рассеянные на атомах матрицы. Если масса примесного атома меньше массы атома матрицы, то регистрацию проводить трудно, так как будет мешать фон, возникающий из-за рассеяния на атомах матрицы. В этом случае можно регистрировать для определения местоположения примесного атома не рассеянные частицы, а продукты ядерных реакций.

После того как проведена бомбардировка неориентированной мишени, пучок направляют вдоль какого-либо канала и в течение такого же времени измеряют число частиц в детекторе.

Если примесные атомы находятся в замещающем состоянии или внутри области  $r_{\min}$ , то отношение числа регистрируемых частиц при каналировании к числу регистрируемых частиц при неориентированном облучении примерно равно  $y_K/y_H \approx \pi r_{\min}^2 N d$ , т. е. примерно равно доле ионов, не попадающих в канал с самого начала. Типичные значения  $y_K/y_H \approx \approx -5 \cdot 10^{-2}$ , т. е. несколько процентов. Таким образом, если примесные атомы локализованы внутри области  $r_{\min}$ , получается сильное уменьшение выхода при каналировании, примерно на два порядка, по сравнению со случаем облучения неориентированной мишени. Примесные атомы, например, в Si и Ge могут занимать тетраэдральные междоузлия. Вдоль рядов  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 100 \rangle$  эти междоузельные положения затенены атомами, а вдоль  $\langle 110 \rangle$  они находятся вне области  $r_{\min}$ . Этот факт используется при интерпретации экспериментов. Если же примесные атомы находятся за областью  $r_{\min}$ , т. е. в области, доступной каналированным ионам (или, другими словами, в междоузельных положениях), то считалось, что в этом случае не должно быть уменьшения выхода частиц при каналировании, т. е. при этом  $y_K/y_H = 1$ . Это последнее допущение неявно предполагает, что поток ионов в канале является однородным, т. е. таким же, как и при входе в канал на поверхности.

Это предположение об однородности потока ионов в канале является основным, оно использовалось при интерпретации экспериментов, которые проводились в 1966—1970 гг. (см., например, <sup>24-26</sup>). В этих экспериментах, естественно, не ставился вообще вопрос о возможности определения местоположения примесного атома, находящегося в междоузельном положении, за областью  $r_{\min}$ . Действительно, если поток в канале однороден, то независимо от того, в каком именно междоузельном положении находится примесный атом, число регистрируемых в детекторе частиц будет неизменным при одинаковых условиях.

Наша работа, в основном, посвящена исследованию распределения потока каналированных ионов. Как мы увидим ниже, основное предположение, которое использовалось при интерпретации экспериментов, а именно, предположение об однородности потока ионов в канале, оказалось неверным. Вследствие этого количественная, а в ряде случаев и качественная, интерпретация этих экспериментов оказалась некорректной.

Имеется, однако, другой, значительно более важный вывод. Вследствие того, что происходит перераспределение потока ионов в канале, число регистрируемых в детекторе частиц будет меняться в зависимости от того, в каком именно междоузельном положении находится примесный атом. Таким образом, *благодаря эффекту пространственного перераспределения потока ионов в кристаллической решетке оказывается возможным определить точное местоположение примесного атома, находящегося в междоузельном положении.*

Этот факт имеет принципиальное значение в ряде областей физики твердого тела, особенно в физике сверхтонких взаимодействий и радиационной физике твердого тела. Перейдем к детальному исследованию вопроса о перераспределении потока частиц в решетке.

б) Статистическое равновесное распределение при аксиальном каналировании. Статистическое описание каналирования было использовано Линдхардом <sup>18</sup>. Такое описание является удобным для рассмотрения эффекта перераспределения потока частиц.

Потенциал  $U_t(r)$ , создаваемый в точке  $r$ , есть сумма потенциалов отдельных атомных цепочек, т. е.

$$U_t(r) = \sum_{i=1}^n U(r - r_i), \quad (2.1)$$

где  $U$  — потенциал отдельной цепочки,  $r_i$  — положение цепочки, а  $n$  — число атомных цепочек, формирующих канал. Частица, падающая на кристалл в точку  $r$  перпендикулярно рассматриваемой поперечной плоскости, может обладать поперечной энергией  $E_{\perp}$ , которая определяется из равенства

$$E_{\perp} = U_t(r) = \frac{Mv_{\perp}^2}{2}; \quad (2.2)$$

$v_{\perp}$  — поперечная скорость,  $M$  — масса частицы. Это равенство определяет область, доступную иону с заданной поперечной энергией.

В начале пучок частиц имеет некоторое начальное распределение в четырехмерном фазовом пространстве. По мере прохождения через кристалл будет наблюдаться тенденция к установлению статистического равновесия. Вследствие этого можно перейти к статистическому описанию каналирования, не рассматривая детально последовательность столкновений ионов с атомными цепочками.

Вследствие того, что в двумерном пространстве импульсов объем пропорционален  $dE_{\perp}$ , оказывается, что для частицы с данной поперечной энергией  $E_{\perp}$  вероятность нахождения в элементарной площадке  $dS$  поперечной плоскости,  $dW/dS$ , не зависит от  $r$ :

$$\frac{dW}{dS} = \begin{cases} 0, & E_{\perp} < U_t(r), \\ \frac{1}{S(E_{\perp})}, & E_{\perp} > U_t(r), \end{cases} \quad (2.3)$$

где  $S(E_{\perp})$  — доступная область для иона с энергией  $E_{\perp}$ . Эта формула показывает, что при аксиальном каналировании ион равномерно заполняет доступную область. Такое простое распределение имеет место только в двумерном случае<sup>37</sup>.

в) Время установления равновесного распределения. Вопрос о возможности использования статистического описания, в частности формулы (2.3), обсуждается в литературе<sup>27</sup> вплоть до настоящего времени. Представляется поэтому важным оговорить достаточно подробно пределы применимости статистического подхода.

Необходимо сказать, прежде всего, что если система обладает стохастической необратимостью, свойствами перемешивания, то такую систему можно описать статистически. При этом особо оговаривается, что из-за конечного разрешения физического прибора мы всегда имеем дело хоть с малым, но всегда конечным объемом ячейки фазового пространства.

Рассмотрим, например, выход ядерной реакции в зависимости от глубины, когда пучок частиц направлен вдоль оси канала. Из-за периодического характера движения частиц в канале выход также будет осциллировать по глубине, однако на больших глубинах из-за фазового перемешивания траекторий частиц осцилляции исчезнут.

В то же время, если использовать формулу (2.3) для расчета этого процесса, никаких осцилляций такое описание не дает.

Возникает поэтому вопрос, на каких глубинах можно использовать статистическое описание.

Очень маленькие осцилляции будут иметь место вплоть до весьма больших глубин. Однако, крупномасштабные осцилляции, порядка четверти длины волны частицы в канале, быстро исчезают из-за фазового перемешивания. В данном случае вопрос о том, на каких глубинах возможно обнаружение осцилляций, зависит от разрешения детектора. Характерное разрешение по глубине современных детекторов составляет сотню ангстрем. Когда пучок протонов и  $\alpha$ -частиц с  $E \sim 1$  Мэв пускают вдоль канала, на таких детекторах практически невозможно уже обнаружить осцилляцию выхода после нескольких колебаний иона в канале. В то же время средний выход, регистрируемый детектором на таких малых глубинах, вполне правильно определяется, когда расчет проводится с помощью формулы (2.3).

Ясно, что в физическом эксперименте, когда прослеживается динамика системы за конечное время, мы почти никогда не имеем полного статистического равновесия в очень малом объеме ячейки фазового пространства, но из-за конечности разрешения прибора для вероятностного описания эволюции системы в этом и нет никакой необходимости.

Линдхард <sup>18</sup>, используя потенциал  $U(\rho) = \frac{\alpha_2}{\rho}$  ( $\rho$  — расстояние от цепочки,  $\alpha_2 = (\pi/2)Z_1Z_2e^2a/d$ ), рассмотрел вопрос о рассеянии иона на атомных цепочках в предположении, что эти цепочки распределены хаотически. При этом оказалось, что существенное изменение направления начального импульса иона происходит на глубинах порядка  $\lambda$ , где

$$\lambda^{-1} \approx \frac{\pi N d \alpha_2}{E_{\perp}} \quad (2.4)$$

для иона с поперечной энергией  $E_{\perp}$ . Для легких ионов при  $E_{\perp} \approx E\psi_1^2$  ( $E\psi_1^2$  — критическая поперечная энергия, при которой еще возможно каналирование) значение  $\lambda < 1000$  атомных слоев.

При каналировании частица движется на расстоянии больше, чем  $a$ , от цепочки, где лучше использовать потенциал типа  $U \sim \rho^{-2}$ . Для этого потенциала <sup>28</sup>

$$\lambda^{-1} \approx \sqrt{3} N d a \psi_1, \quad (2.5)$$

т. е.  $\lambda$  не зависит от поперечной энергии;  $\psi_1$  — критический угол Линдхарда.

Наличие регулярного расположения цепочек приводит к тому, что при аксиальном каналировании угловое распределение может оказаться асимметричным из-за плоскостной блокировки <sup>28</sup>. Вследствие этого  $\lambda$  может приближаться к 1 мкм, что соответствует эксперименту <sup>29</sup>.

Несмотря на такое влияние плоскостей на аксиальное каналирование, последнее существенно отличается от плоскостного каналирования. Специальные эксперименты <sup>30</sup> показывают, что аксиальное каналирование является двумерным, обусловленным, прежде всего, потенциалами атомных цепочек, а плоскостное каналирование одномерно.

Понятие доступности области для аксиального каналирования, использованное Линдхардом, является правомерным, несмотря на наличие плоскостей, вследствие того, что потенциальные барьеры и градиенты атомных цепочек существенно выше плоскостных.

Машинные расчеты <sup>31</sup> и эксперименты <sup>32</sup> подтверждают эти основные представления теории Линдхарда.

В ряде случаев представление о равновесном распределении можно использовать, имея в виду лишь конфигурационное пространство, т. е. поперечную плоскость при аксиальном каналировании. Действительно, из-за плоскостной блокировки равновесие в фазовом пространстве наступит

пает лишь на глубинах  $\sim 1$  мкм, но это еще не означает, что на меньших глубинах нельзя использовать равновесное распределение. Во многих случаях можно не интересоваться наступлением равновесия в импульсном пространстве, т. е. угловым распределением.

Например, при расчете потока частиц по сечению канала нас, в первую очередь, интересует просто общее число частиц, пересекающих рассматриваемый элемент площади, независимо от того, каково направление скорости этих частиц. Естественно, возникает вопрос о том, на каких глубинах можно использовать формулу (2.3) в этом случае и как сильно влияет асимметрия в угловом распределении на равномерное заполнение доступной области.

Чтобы точно ответить на этот вопрос, следует провести детальный расчет без использования формулы (2.3) и статистический расчет с ее использованием и определить глубину, на которой оба расчета дают одинаковую величину с учетом разрешения детектора.

Такие расчеты (см., например, разделы ж) гл. 2 и а) гл. 3 показывают, что для протонов и  $\alpha$ -частиц с  $E \sim 1$  Мэв представлением о равновесии в конфигурационном пространстве можно пользоваться на глубинах  $\sim 1000$  Å. Для более тяжелых ионов эти глубины меньше.

Когда угловое распределение еще не является симметричным (т. е. когда еще нет равновесия), как отмечалось выше, имеет место плоскостная блокировка при аксиальном каналировании. Это приводит к тому, что в некоторых местах в поперечной плоскости ряд позиций может быть затенен, т. е., строго говоря, при этом нельзя пользоваться в общем случае формулой (2.3). Тем не менее есть ряд экспериментов, когда использование формулы (2.3) оправдано и в этом случае. Одним из них является эксперимент по определению местоположения примесного атома. Из-за симметрии кристалла какое-либо вполне определенное междоузельное положение в поперечной плоскости, как правило, занимает не одно, а много позиций. Поэтому, даже если какая-либо из этих позиций затенена, можно говорить о равновесии в поперечной плоскости, так как для остальных позиций практически анизотропия в угловом распределении не будет сказываться. Таким образом, в этом случае асимметрия в угловом распределении будет слабо сказываться на равномерном заполнении доступной области.

Поэтому ясно, что имеет смысл провести специальные расчеты, для того чтобы установить, когда можно приближенно пользоваться понятием о равномерном заполнении доступной области в поперечной плоскости.

Атомные цепочки создают в поперечной плоскости потенциал, близкий к гармоническому. Траектория иона в таком поле представляет собой эллипс. Так как реальный потенциал содержит также ангармоническую часть, эллипс вращается и описывает фигуры типа Лиссажу, которые более или менее равномерно заполняют доступную область. В течение  $2 \div 3$  периодов колебания иона в таком поле происходит достаточно равномерное заполнение области. Глубина, на которой наступает такое заполнение, равна

$$\lambda \approx \frac{2\pi b^2}{a \sqrt{3} n \psi_1}, \quad (2.6)$$

где  $n$  — число атомных цепочек, формирующих канал,  $b$  — радиус канала,  $\psi_1$  — критический угол Линдхарда,  $a$  — параметр экранирования. Равновесие наступает из-за неупругого рассеяния частиц на электронах, причем ангармонизм потенциала способствует более быстрому фазовому перемешиванию траекторий частиц. Оценка (2.6) верна для большей части пучка. Для хорошо каналированных частиц, для которых ангармоническая

часть потенциала очень мала, равновесие наступает на больших глубинах. Однако доля таких частиц в пучке из-за рассеяния на поверхности, расходимости пучка и т. д. незначительна. Каган и Кононец<sup>20</sup> показали с совершенно других позиций, что распределение каналированных частиц становится независимым от начальных условий также на глубинах порядка тысячи атомных слоев.

г) Р а с п р е д е л е н и е п о т о к а и о н о в в а к с и а л ь н о м к а н а л е. Пусть единичный поток ионов падает нормально на площадь  $S_0$ , приходящуюся на один аксиальный канал. Площадь  $S_0$  не всегда равна площади  $\pi r_0^2$ , которая приходится на одну цепочку. В общем случае можно записать  $S_0 = \pi r_0^2 \alpha^{-1}$ , где  $\alpha$  — отношение числа аксиальных каналов к числу атомных цепочек, формирующих канал. В Si, например,  $\alpha = 1/2$  в направлении  $\langle 110 \rangle$ ,  $\alpha = 1$  в —  $\langle 100 \rangle$ ,  $\alpha = 2$  в направлении  $\langle 111 \rangle$ .

На рис. 1 показаны эквипотенциальные поверхности в Si и эффективный поток. Как видно из этого рисунка, максимальное значение потока

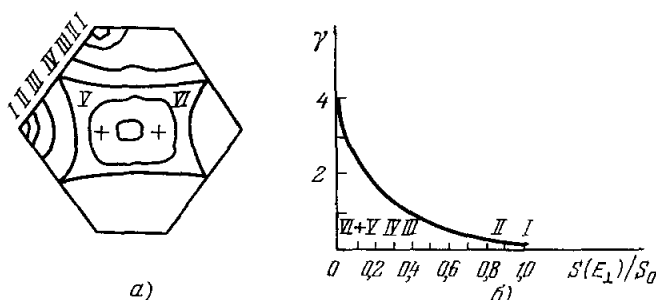


Рис. 1. Эквипотенциальные линии в Si в направлении  $\langle 100 \rangle$  (a) и распределение потока в канале  $\langle 110 \rangle$  в Si (б).

Знак «+» изображает тетраэдральное междоузлие.

в центре канала выше потока на периферии, вблизи атомной цепочки, примерно на три порядка, т. е. поток существенно неоднороден.

Эффект перераспределения ионов можно объяснить следующим образом. Центр канала доступен всем ионам, причем ионы с малыми поперечными энергиями в основном пребывают там. Периферийная часть канала доступна лишь небольшой части ионов с большими поперечными энергиями. Это обстоятельство и объясняет столь резкое изменение потока по сечению канала.

Оценим поток ионов  $F$  на некоторой эквипотенциали  $\bar{S}(E_\perp)$ , ограничивающей поверхность  $S(E_\perp)$ . Если рассматриваемая поперечная энергия не очень мала, ее значение определяется потенциалом одной цепочки, т. е.  $E_\perp = U(\rho)$ , где  $\rho$  — расстояние от цепочки. При этом  $S(E_\perp) = \pi(r_0^2 - \rho^2)\alpha^{-1}$ . При нормальном падении ионов на площадь  $S_0$ , распределение ионов по минимальным прицельным параметрам  $\rho_1$  относительно цепочки имеет вид (при  $\alpha = 1$ )

$$\frac{dn}{d\rho_1} = \frac{2\rho_1}{r_0^2}, \quad (2.7)$$

или

$$dn = \frac{dS}{S_0}. \quad (2.8)$$

Поток, создаваемый ионами, имеющими доступную область от  $S$  до  $S + dS$ , равен  $(1/S_0) dS/S$ . Поток на некоторой эквипотенциали  $\bar{S}(E_\perp)$  создается лишь теми ионами, доступная область которых превышает  $S(E_\perp)$  и лежит, таким образом, между  $S(E_\perp)$  и  $S_0$ .

Отсюда видно, что поток на эквипотенциали  $\bar{S}(E_\perp)$  равен

$$F = \frac{1}{S_0} \int_{S(E_\perp)}^{S_0} \frac{dS}{S} = \frac{1}{S_0} \ln \left| \frac{S_0}{S(E_\perp)} \right|. \quad (2.9)$$

Если учесть, что доля ионов, равная  $S_{un}/S_0$  (где  $S_{un}/S_0 = \pi r_{\min}^2 Nd$ ), не попадает в режим каналирования и что эта часть ионов дает нормальный вклад в поток, формулу для потока можно записать более корректно:

$$F = \frac{1}{S_0} \left( \ln \left| \frac{S_0 - S_{un}}{S(E_\perp)} \right| + \frac{S_{un}}{S_0} \right). \quad (2.10)$$

Обычно  $S_{un}/S_0 \approx 10^{-2} \ll 1$ , так что практической разницы между этими двумя формулами нет.

Относительный поток ионов в канале, нормированный к потоку при произвольном, неориентированном облучении,  $\gamma$ , очевидно, равен

$$\gamma = \ln \left| \frac{S_0}{S(E_\perp)} \right|. \quad (2.11)$$

При малых  $E_\perp$ ,  $S(E_\perp)$  стремится к нулю, т. е.  $\gamma$  имеет логарифмическую особенность. При больших  $E_\perp$ ,  $S(E_\perp)$  стремится к  $S_0$  и в этом случае поток на некотором малом расстоянии  $\rho$  от цепочки равен

$$\gamma = \frac{\rho^2}{r_0^2}, \quad (2.12)$$

так как при больших  $E_\perp$   $S(E_\perp) = \pi(r_0^2 - \rho^2)\bar{\alpha}^{-1}$ . Сравнивая (2.11) и (2.12), видим, что в предельном случае больших  $E_\perp$   $\gamma \ll 1$ , в то время как при малых  $E_\perp$ ,  $\gamma \gg 1$ , т. е. формула (2.10) описывает также эффект тени. Эти особенности перераспределения потока ионов в поперечной плоскости приводят к тому, что эффективное сечение рассеяния ионов на дефекте (т. е. примесном или смещенном атоме) зависит существенно от места его расположения. Формулы (2.9)–(2.12) являются основными в теории эффекта перераспределения потока. Ранее они были получены в работах <sup>33–37</sup>.

д) Зависимость потока от угла падения ионного пучка на кристалл. В предыдущем пункте рассматривался случай, когда внешний угол  $\psi_{in} = 0$ . Рассмотрим теперь случай, когда  $\psi_{in} \neq 0$ . Чтобы провести анализ, вначале рассмотрим изменение потенциала в канале с расстоянием. В центральной части канала абсолютные значения потенциала и изменение потенциала на некоторой малой длине  $\delta r$  малы. В то же время вблизи атомной цепочки соответствующие значения велики, т. е.  $(\delta U/\delta r)_\pi \delta r \ll (\delta U/\delta r)_\pi \delta r$ , где «ц» означает центральную часть канала, а «п» — периферийную часть канала. Когда ион падает на кристалл под углом  $\psi_{in}$ , меньшим критического угла каналирования, можно записать

$$E_A = U(\rho) + E\psi_{in}^2 = U(\rho'), \quad (2.13)$$

где  $\rho$  — точки падения. Когда  $\psi_{in} = 0$ , минимальный прицельный параметр относительно цепочки есть просто точка падения, т. е.  $\rho$ .

При  $\psi_{in} \neq 0$  из-за дополнительной поперечной энергии, равной  $E\psi_{in}^2$ , ион может приблизиться к цепочке на расстояние<sup>1</sup>  $\rho$ , которое определяется из (2.13). При этом, очевидно, меняется доступная область, по сравнению с тем, что было при  $\psi_{in} = 0$ . Если, однако, ион падает на кристалл в периферийной области, т. е. вблизи цепочки, доступная область практически не меняется, так как там значение потенциала велико. Поэтому дополнительное увеличение поперечной энергии на величину  $E\psi_{in}^2$  мало скажется вблизи цепочки. Если же ион падает на кристалл в районе центра канала, доступная область резко увеличивается, так как потенциальный барьер там очень мал. В центральной части канала потенциал можно принять гармоническим:

$$U_t(r) = \frac{n\alpha_1}{b^4} r^2, \quad (2.14)$$

где  $\alpha_1 = Z_1 Z_2 e^2 (Ca)^2/d$  ( $c \approx \sqrt{3}$ ),  $b$  — радиус канала.

Этот потенциал получается разложением в ряд потенциала отдельной атомной цепочки  $U = \alpha_1/\rho^2$  и суммированием по  $n$  цепочкам, формирующим канал.

Если при  $\psi_{in} = 0$  ион падал в центр канала, его доступная область равнялась нулю. Если же  $\psi_{in} \neq 0$ , то доступной является область, равная  $\pi E\psi_{in}^2/A$ , где  $A = n\alpha_1/b^4$ . При  $\psi_{in} = 0$  область, в которой сосредоточены точки возврата для каналированных ионов, равна  $S_0 - S_{un}$ . При внешнем угле  $\psi_{in} \neq 0$  эта область приблизительно равна  $S_0 - S_{un} - \pi E\psi_{in}^2/A$ .

Оценим относительный поток на некоторой эквипотенциальной линии  $\bar{S}_{l_0}$ , ограничивающей область  $S_{l_0}$  при  $\psi_{in} \neq 0$ . Пусть  $S_{l_0} > \pi E\psi_{in}^2/A$ . Очевидно, при  $\psi_{in} = 0$  доля ионов, которая не может достигнуть эквипотенциала  $\bar{S}_{l_0}$ , равна  $S_{l_0}/S_0$ , а при  $\psi_{in} \neq 0$  эта же доля равна  $(S_{l_0} - \pi E\psi_{in}^2/A)/S_0$ .

Из этого рассмотрения получаем, пользуясь тем же методом, что и в предыдущем разделе, что

$$\gamma(\bar{S}_{l_0}) = \ln \left| \frac{S_0 - \pi E\psi_{in}^2/A - S_{un}}{S_{l_0} - (\pi E\psi_{in}^2/A)} \right| + \frac{S_{un} + \pi E\psi_{in}^2/A}{S_0}. \quad (2.15)$$

При небольших начальных углах  $\psi_{in}$   $(S_{un} + \pi E\psi_{in}^2/A)/S_0 \ll 1$ , т. е.

$$\gamma(\bar{S}_{l_0}) \approx \ln \left| \frac{S_0}{S_{l_0} - (\pi E\psi_{in}^2/A)} \right|. \quad (2.16)$$

При  $\psi_{in} = 0$  получаем прежний результат. В центре канала, когда  $S_{l_0} = 0$ ,

$$\gamma = \ln \left| \frac{S_0 A}{\pi E\psi_{in}^2} \right|. \quad (2.17)$$

Интересной особенностью формулы (2.16) является наличие логарифмической особенности при  $\psi_{in}^2 = S_{l_0} A/\pi E$ . С этими особенностями связаны двойные и многократные пики в угловом распределении каналированных ионов (см. ниже раздел 3).

Тот факт, что в формуле (2.16) значение потока имеет максимум при  $\psi_{in}^2 = S_{l_0} A/\pi E$ , объясняется просто. При углах  $\psi_{in}^2 > S_{l_0} A/\pi E$  ионы имеют доступную область  $> S_{l_0}$ , так что значение  $\gamma(\bar{S}_{l_0})$  при этом небольшое. При  $\psi_{in}^2 < S_{l_0} A/\pi E$  некоторая часть ионов вообще не достигает эквипотенциала  $\bar{S}_{l_0}$ . При  $\psi_{in}^2 = S_{l_0} A/\pi E$  все ионы достигают  $\bar{S}_{l_0}$ , причем доступные области лежат в интервале  $\{S_0, S_{l_0}\}$ . Таким образом, при  $\psi_{in}^2 \approx S_{l_0} A/\pi E$  поток на линии  $\bar{S}_{l_0}$  имеет значение, близкое к максимальному значению.

е) Многократное рассеяние и его влияние на перераспределение потока ионов. Во всех вышеприведенных формулах предполагается, что поперечная энергия иона  $E_{\perp}$  остается постоянной. Поперечная энергия иона, однако, меняется из-за рассеяния на электронах, на тепловых колебаниях атомов решетки, дефектах и т. д.

Вследствие изменения  $E_{\perp}$  меняется и доступная область  $S(E_{\perp})$ , а это, в свою очередь, изменяет распределение потока по глубине. До сих пор рассматривалось значение потока в канале непосредственно после установления статистического равновесного распределения. Теперь проследим зависимость потока от глубины, для чего необходимо рассчитать многократное рассеяние.

Многократное рассеяние каналированных частиц на электронах и в ядрах существенно уменьшается по сравнению с рассеянием частиц в неориентированной мишени, так как траектории каналированных частиц проходят вдали от ядер в областях с малыми электронными плотностями. При этом многократное рассеяние носит характер флуктуаций угла каналирования. Решение задачи нахождения углового распределения частиц в канале требует другого подхода, отличного от обычного подхода в теории рассеяния в однородной среде. Связано это с тем, что многократное рассеяние накладывается на движение в непрерывном потенциале атомных ядер. Проблема многократного рассеяния каналированных ионов сама по себе представляет интерес. Из-за того, что каналированные ионы не подходят близко к ядрам, сечение физических реакций (например, ядерных реакций, образование радиационных дефектов, ядерное торможение, образование характеристического излучения, ионизация и т. д.) существенно меняются. Однако, если ион деканализирует, сечение становится нормальным. Поэтому для широкого круга задач, связанных с использованием эффекта каналирования, необходимо знать функцию деканализирования.

Рассмотрим вначале несохранение поперечной энергии из-за рассеяния иона, обусловленного тепловыми колебаниями атомов решетки. О влиянии тепловых колебаний на каналирование см. также работу Кадменского и др.<sup>122</sup>. Так как атомы смещаются из равновесного положения, на каналированную частицу действует флуктуационная сила  $\Delta F$ , причем  $\overline{\Delta F^2} = \overline{(F - F')^2}$ , где  $F = -\nabla U(r)$ ,  $F' = -\nabla U(r + \Delta r)$ ,  $\Delta r$  — смещение атома.

Приращение поперечной энергии  $\langle \delta E_{\perp} / \delta x \rangle$  на единицу длины связано с  $\overline{\Delta F^2}$  соотношением

$$\frac{\langle \delta E_{\perp} \rangle}{\delta x} = \frac{d}{4E} \langle \overline{\Delta F^2} \rangle, \quad (2.18)$$

где скобки  $\langle \dots \rangle$  означают усреднение по доступной области. Линдхард<sup>18</sup> вычислил значение  $\overline{\Delta F^2}$  с точностью до членов  $\sim \frac{u_{\perp}^2}{r^2}$ , где  $u_{\perp}^2$  — среднеквадратичная амплитуда теплового колебания. Во многих случаях желательно знать более точное значение  $\overline{\Delta F^2}$ .

В работах<sup>39,40</sup> было показано, что с точностью  $\sim u_{\perp}^4 / r^4$  имеем

$$\begin{aligned} \overline{\Delta F^2} = \frac{u_{\perp}^2}{2} \left[ (F')^2 + \left( \frac{F}{r} \right)^2 \right] + \frac{(u_{\perp}^2)^2}{4} \left[ \frac{3}{4} \frac{F^2}{r^4} - \frac{1}{2} \frac{FF'}{r^3} - \right. \\ \left. - \frac{1}{4} \frac{(F')^2}{r^2} + \frac{1}{2} \frac{FF''}{r^2} + \frac{3}{2} \frac{F'F''}{r} + \frac{3}{4} (F'')^2 + F'F''' \right], \quad (2.19) \end{aligned}$$

где

$$F = \frac{d}{dr} u(r), \quad F' = \frac{d}{dr} F, \quad F'' = \frac{d^2 F}{dr^2} \text{ и т. д.} \quad (2.20)$$

Первый член в (2.19) соответствует выражению Линдхарда. При использовании (2.19) и потенциала  $U(r) = \alpha_2/r$  приращение поперечной энергии равно

$$\left\langle \frac{\delta E_{\perp}}{\delta x} \right\rangle = \frac{5}{16} \frac{u_{\perp}^2}{r_0^2} \frac{d}{E} \frac{E_{\perp}^4}{\alpha_2^2} \left( 1 + 4 \frac{u_{\perp}^2 E_{\perp}^2}{\alpha_2^2} \right). \quad (2.21)$$

Изменение  $\delta E_{\perp}$  обусловлено также неупругим рассеянием на электронах. Для простых оценок принимают, что  $\delta E_{\perp}$  пропорционально той части энергетических потерь, которая обусловлена близкими столкновениями<sup>18</sup>.

Вдали от ядер приращение  $\delta E_{\perp}$ , связанное с неупругим рассеянием на электронах, намного превышает  $\delta E_{\perp}$ , вызванное тепловыми колебаниями атомов решетки.

Приращение  $\delta E_{\perp}$ , связанное с дискретностью атомной цепочки, намного меньше изменения  $\delta E_{\perp}$ , связанного с тепловыми колебаниями<sup>41</sup>, поэтому эту поправку можно не учитывать. Недавно Фирсов<sup>123</sup> показал, что дискретность пренебрежимо мала при каналировании.

Линдхард<sup>18</sup> предположил, что во многих случаях можно считать, что изменение поперечной энергии с глубиной происходит плавно, без флуктуаций. Это приближение Линдхарда, известное как приближение монотонного набора поперечной энергии, использовалось в ряде работ<sup>42-46</sup> для расчета функции деканалирования. Последовательное и строгое решение задачи было дано в работах<sup>47-49</sup>, где учитывалась диффузия частиц в пространстве поперечной энергии. В работах<sup>47-50</sup> был получен явный вид коэффициента диффузии при каналировании.

Так как приращение поперечной энергии  $\delta E_{\perp}$  при кулоновском рассеянии, описываемом формулой Резерфорда, — малая по сравнению с  $E_{\perp}$  величина, можно использовать приближение Фоккера — Планка для изучения поведения каналированных ионов. Уравнение Фоккера — Планка для функции распределения  $f(E, E_{\perp}, x)$  имеет вид ( $E$  — полная энергия иона,  $x$  — глубина)

$$\frac{\partial f}{\partial x} = - \frac{\partial}{\partial E_{\perp}} \left( \left\langle \frac{\Delta E_{\perp}}{\Delta x} \right\rangle f \right) + \frac{1}{2} \left( \left\langle \frac{\Delta E_{\perp}^2}{\Delta x} \right\rangle f \right) - \frac{\partial}{\partial E} \left( \left\langle \frac{\Delta E}{\Delta x} \right\rangle f \right), \quad (2.22)$$

где усреднение  $\langle \dots \rangle$  производится по доступной области. Коэффициенты в (2.22) связаны друг с другом соотношением

$$\frac{1}{2} \left\langle \frac{\Delta E_{\perp}^2}{\Delta x} \right\rangle = \left\langle \frac{\Delta E_{\perp}}{\Delta x} [E_{\perp} - U(r)] \right\rangle. \quad (2.23)$$

Если пренебречь изменением полной энергии, уравнение (2.22) можно переписать в виде<sup>47</sup>

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{1}{S(E_{\perp})} \left[ \frac{\partial}{\partial E_{\perp}} S(E_{\perp}) D(E_{\perp}) \frac{\partial}{\partial E_{\perp}} \right] - \frac{\partial}{\partial E_{\perp}} \left[ \left\langle \frac{\Delta E_{\perp}}{\Delta x} \right\rangle_{\text{торм.}} S(E_{\perp}) f \right], \quad (2.24)$$

причем коэффициент диффузии можно записать в двух формах:

$$D = \frac{1}{2} \left\langle \frac{\Delta E_{\perp}}{\Delta x} \right\rangle = \frac{1}{S(E_{\perp})} \int_0^{E_{\perp}} S(E'_{\perp}) \left\langle \frac{\Delta E_{\perp}}{\Delta x} \right\rangle dE'_{\perp} \quad (2.25)$$

или

$$D = \left\langle \frac{\Delta E_{\perp}}{\Delta x} (E_{\perp} - U(r)) \right\rangle. \quad (2.26)$$

Эти формулы дают возможность рассчитать аналитически диффузионные коэффициенты при каналировании.

Например, для потенциала  $U(r) = \alpha_2/r$  при больших поперечных энергиях, когда  $r_0^2 \gg r_1^2(E_\perp)$ , где  $E_\perp = U(r_1)$ , получаем, что диффузионный коэффициент, связанный с рассеянием на электронах,  $D_e$ , равен

$$D_e \approx \frac{Z_1^2 e^2 L_e}{4 E r_0^2} E_\perp^2, \quad (2.27)$$

где  $L_e = \ln \left| \frac{2mv^2}{I} \right|$ ,  $I$  — ионизационный потенциал атома. Соответствующий диффузионный коэффициент, связанный с рассеянием каналированной частицы на тепловых колебаниях,  $D_{th}$ , равен

$$D_{th} \approx \frac{u_\perp^2}{16 r_0^2 \alpha_2^2 E} \frac{dE_\perp}{dE} \left( 1 + \frac{3u_\perp^2 E_\perp^2}{\alpha_2^2} \right). \quad (2.28)$$

Из сравнения этих двух формул видно, что  $D_{th}$  растет с ростом  $E_\perp$  гораздо быстрее, чем  $D_e$  (см. ниже рис. 4).

При больших энергиях, когда  $E > (M/m) E_\perp^c$  (где  $E_\perp^c$  — критическая поперечная энергия Линдхарда), в уравнении (2.24) можно пренебречь последним членом. Если, кроме того, принять, что  $S(E_\perp) = \text{const}$ , то уравнение Фоккера — Планка (2.24) переходит в обычное уравнение диффузии в пространстве поперечной энергии (уравнение Фика). Но такое, чисто диффузионное, приближение обладает тем существенным недостатком, что при этом не может быть описан эффект перераспределения потока каналированных частиц.

Из уравнений (2.22) и (2.24) следует, что в задаче об уходе частиц из канала, кроме обычного члена, учитывающего возрастание поперечной энергии, необходимо рассмотреть также диффузионного члена.

В то же время уравнение (2.24) не является обычным диффузионным уравнением. Новым здесь, помимо последнего члена, является наличие весовой функции  $1/S(E_\perp)$  перед квадратной скобкой и множителя  $S(E_\perp)$  внутри нее.

Появление этих множителей физически обусловлено, в конечном счете, тем, что рассеяние каналированных ионов происходит не в свободном пространстве, а в поле, создаваемом атомами кристалла.

При выводе кинетического уравнения (2.24) используются следующие предположения:

1) Суммарный потенциал, создаваемый в канале атомами цепочки, заменяется непрерывным потенциалом атомной цепочки.

2) Предполагается наличие статистического равновесия.

3) Изменение энергии иона из-за неупругого рассеяния на электронах и тепловых колебаниях считается много меньшим энергии иона.

Предположение 1), как было показано Линдхардом<sup>18</sup>, является вполне приемлемым. Предположение 2) приводит к тому, что уравнением (2.24) можно пользоваться лишь на глубинах  $\gtrsim 1000 \text{ \AA}$ . Предположение 3) также вполне оправдано, так как в кулоновских столкновениях основную роль играют далекие столкновения, при которых изменение импульса или энергии частицы в одном столкновении пренебрежимо мало.

Уравнение (2.24) является наиболее общим в классической теории каналирования. На его основе описываются все основные особенности прохождения каналированного пучка через кристалл.

Уравнение (2.24) описывает не только каналирование, но и эффект тени (блокирование), когда частица испускается из узла кристаллической решетки. При этом оказывается, что последний член в уравнении (2.24) описывающий изменение поперечной энергии, вызванное ионизационным

торможением, оказывает противоположное<sup>51</sup> влияние на каналирование и блокирование. Учет этого члена понижает выход частиц для каналирования и повышает для блокирования. Такое поведение выхода частиц,  $\chi$ , легко объясняется.

При каналировании выход обратно рассеянных частиц обеспечивается частицами, которые увеличили свою поперечную энергию до критической, а торможение препятствует увеличению поперечной энергии. При блокировании, наоборот, выход частиц вдоль оси канала происходит благодаря уменьшению их поперечной энергии, и торможение способствует этому. Оказывается, что даже на малых глубинах, когда изменение полной энергии  $\Delta E$  мало, так что  $\Delta E/E \ll 1$  выход при блокировании,  $\chi^{bl}$ , существенно превышает выход при каналировании,  $\chi^k$ . Эксперименты<sup>52,53</sup> полностью подтверждают этот вывод.

Для того чтобы сравнить приближение монотонного набора поперечной энергии с решением кинетического уравнения, был проведен ряд расчетов<sup>47-49</sup>. На рис. 2 показана функция деканалирования, полученная в приближении монотонного набора поперечной энергии. Там же приведен для сравнения результат расчетов в диффузионном приближении.

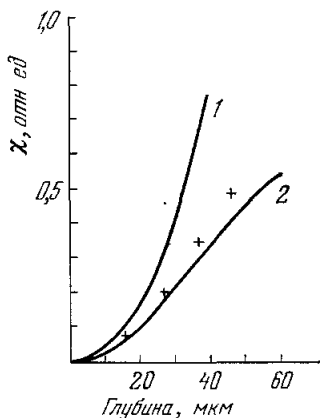


Рис. 2. Зависимость доли деканализованных ионов от глубины в Si ( $\langle 110 \rangle$ ,  $t = 25^\circ\text{C}$ ). 1 — приближение монотонного набора; 2 — диффузионное приближение. Расчет проведен для  $\alpha$ -частиц с  $E = 7$  Мэв; значки «+» — экспериментальные данные<sup>52</sup>.

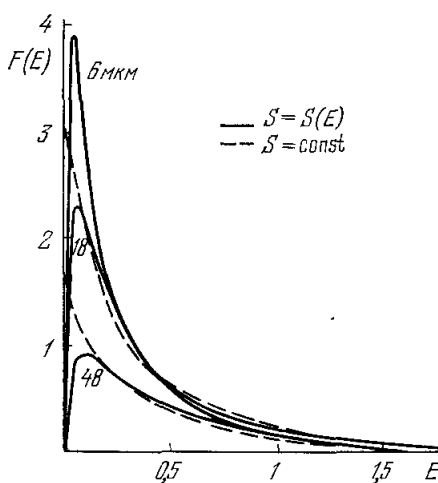


Рис. 3. Изменение функции распределения по глубине в Si ( $\langle 110 \rangle$ ). Расчет проведен для  $\alpha$ -частиц с  $E = 7$  Мэв.

Как видно, при строгом решении кинетического уравнения, т. е. при учете диффузии в пространстве поперечных импульсов доля деканализованных ионов получается существенно меньше, чем в приближении монотонного набора поперечной энергии. Это объясняется тем, что при учете диффузионного члена происходит не непрерывный уход частиц из канала, а размытие первоначальной функции распределения  $f(E, E_\perp, x=0)$  по поперечным энергиям. Это четко видно из рис. 3, где показан ход  $F(E) = S(E_\perp) f(E, E_\perp, x)$  в зависимости от  $E_\perp$  на различных глубинах. Как видно из этого рисунка, на малых глубинах очень велика доля ионов с малыми поперечными энергиями. По мере увеличения глубины происходит перераспределение по  $E_\perp$ , причем относительная роль ионов с малыми  $E_\perp$  уменьшается. Видно, что хотя пик функции

$S(E_{\perp}) f(E, E_{\perp}, x)$  смещается вниз, его положение по оси абсцисс мало меняется (т. е. на самом деле не происходит монотонного переноса этой функции вправо). В то же время благодаря диффузии происходит уширение полуширины функции  $f(E, E_{\perp}, x)$ . Для сравнения на рис. 3 показано решение уравнения (2.24), когда  $S(E_{\perp})$  считается постоянной. Как видно, площади под кривыми не сильно отличаются, однако функциональная зависимость является в этом случае не очень точной.

Определение функции деканалирования обычно проводится с помощью экспериментов по обратному рассеянию. При этом обычно регистрируются частицы, вышедшие из канала вблизи поверхности, т. е. ионы, которые имеют в канале большие поперечные энергии. Эти ионы деканализуют, в основном, из-за рассеяния на тепловых колебаниях. Это видно из рис. 4, где показана зависимость диффузионного коэффициента от электронного и ядерного рассеяния. При этом не чувствуется диффузионный коэффициент, связанный с электронным рассеянием. Поэтому при интерпретации этих экспериментов был недооценен по сути основной механизм деканализирования, электронный, и переоценен ядерный механизм, связанный с тепловыми колебаниями. Время пребывания основной массы ионов в канале определяется при нормальном падении ионного пучка электронным рассеянием. Чтобы прочувствовать это, необходимо регистрировать частицы, идущие с больших глубин. На рис. 2 показаны результаты таких экспериментов <sup>41</sup>.

Решение кинетического уравнения (2.24) дает возможность решить основные задачи, связанные с каналированием ионов. Можно, например, получить зависимость полуширины провала  $\psi_{1/2}$  от температуры, глубины и т. д., а также ряд других важных параметров <sup>48</sup>.

Основным выводом данного пункта является то, что приближение монотонного набора поперечной энергии является во многих случаях неудовлетворительным. Им можно пользоваться лишь для грубых оценок, и то лишь вблизи поверхности, когда из канала выходит не более  $10 \div 20\%$  частиц. Для правильной интерпретации экспериментов необходимо использовать решение кинетического уравнения с учетом диффузионного члена.

Функция распределения частиц по поперечной энергии в зависимости от глубины  $f(E, E_{\perp}, x)$  позволяет рассчитать зависимость потока от глубины. Поток равен

$$\gamma(r, x) = \int_{E_{\perp}^x}^{E_{\perp}^c} f(E, E_{\perp}, x) dE_{\perp} + \chi(x),$$

где  $\chi(x)$  — доля деканализованных ионов,  $E_{\perp}^x = U(r)$  — есть потенциальная энергия иона в канале в данной точке  $r$  ( $r$  — радиус-вектор в поперечном сечении канала),  $E_{\perp}^c = E\psi_1^2$ .

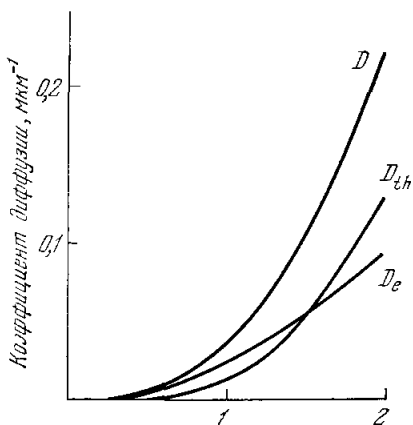


Рис. 4. Зависимость диффузионных коэффициентов от поперечной энергии  $\varepsilon_{\perp}$  в Si  $\langle 110 \rangle$ ,  $t = 25^\circ\text{C}$ .

$D_e$  — электронный коэффициент диффузии,  
 $D_{th}$  — ядерный коэффициент диффузии  
 $(D = D_e + D_{th})$ .

Численные расчеты потока были проведены для случая прохождения протонов с энергией  $3 \text{ Мэв}$  через кремний при комнатной температуре в направлении  $\langle 110 \rangle$  (рис. 5) <sup>48</sup>.

Так как эквипотенциальная линия, определяемая уравнением  $E_{\perp} = U(r)$ , задает целое семейство точек, в которых поток ионов одинаков, то зависимость потока от места  $(r)$  в поперечном сечении канала характеризовалось приведенной потенциальной энергией

$$e_{\perp} = \frac{2E_{\perp}^{\infty}}{E\psi_1^2}.$$

На рис. 5 представлена зависимость потока ионов в центре канала и вблизи атомной цепочки от угла падения  $\psi_{1n}$  на разных глубинах. Из этих данных видно, что возрастание потока сохраняется вплоть до больших

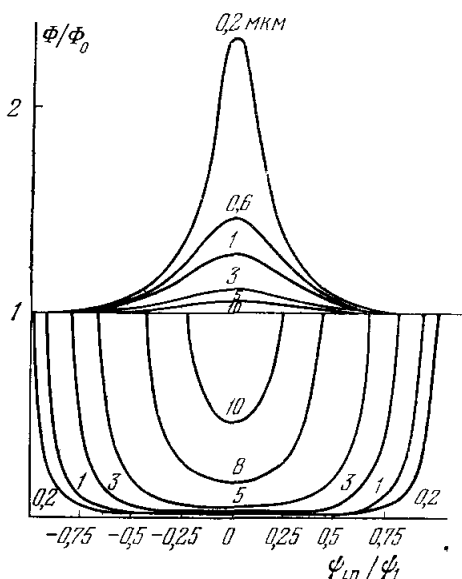


Рис. 5. Зависимость потока в центре канала и вблизи атомной цепочки от угла падения ( $\Phi/\Phi_0 = \gamma$ ).

Расчет проведен для протонов с  $E = 3 \text{ Мэв}$  в Si  $\langle 110 \rangle$ ,  $t = 25^\circ\text{C}$ .

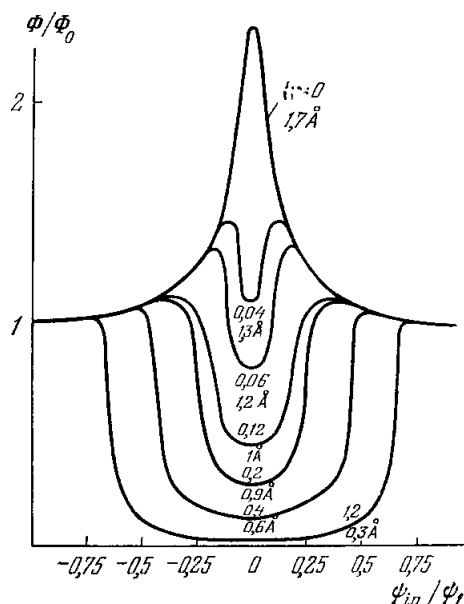


Рис. 6. Поток в разных точках канала  $\langle 110 \rangle$  в Si на глубине  $0,1 \text{ мкм}$ .

Расчет проведен для протонов с  $E = 3 \text{ Мэв}$  ( $t = 25^\circ\text{C}$ ; верхние величины — в ед.  $e_{\perp}$ ).

глубин ( $\geq 10 \text{ мкм}$ ), однако вначале оно быстро падает. Одновременно происходит увеличение потока с глубиной у атомной цепочки. Зависимость потока в разных точках канала от угла падения на глубине  $0,1 \text{ мкм}$  дана на рис. 6. Отметим наличие двойных пиков в центральной части канала.

ж) Распределение потока ионов на малых глубинах. До сих пор рассматривался поток на глубинах, где установилось равновесное распределение. Представляет интерес рассмотреть и малые глубины, вблизи поверхности кристалла.

Движение частицы в канале можно рассматривать как движение броуновской частицы в поле атомных цепочек. Рассеивающими центрами в центральной части канала являются валентные электроны, распределение которых в канале можно считать изотропным.

Суммарный потенциал в канале, формируемом  $n$  атомными цепочками, имеет вид

$$U_t(r) = \frac{n\alpha_1 r^2}{b^4} \left( 1 + \frac{r^2}{b^2} \right), \quad (2.29)$$

если потенциал отдельной цепочки дается выражением  $u(\rho) = \alpha_1/\rho^2$ , где  $\alpha_1 = Z_1 Z_2 e^2 3a^2/d$ ,  $b$  — радиус канала. В центральной части канала  $r/b < 1$  так что ангармоническая часть потенциала там мала.

В первом приближении движение частицы можно рассматривать в двумерной гармонической яме, с осями  $y, z$ , где  $y^2 + z^2 = r^2$ .

Для броуновской частицы в таком поле можно найти решение кинетического уравнения Фоккера — Планка в фазовом пространстве.

С помощью этого решения может быть найдена вероятность  $W(y_0, z_0, y, z, \theta_{0y}, \theta_{0z}, x)$  того, что частица будет находиться в точке с координатами  $(y, z)$  на глубине  $x$ , если при  $x = 0$  частица входит в канал под углом  $\theta_0 = \sqrt{\theta_{0y}^2 + \theta_{0z}^2}$  на расстоянии  $r_0 = \sqrt{y_0^2 + z_0^2}$  от канала <sup>54</sup>.

Формула для  $W$  может быть получена также при учете ангармонизма потенциала. Особенностью гармонического потенциала является то, что поток, рассчитанный на его основе, периодически меняется с глубиной. Несмотря на неупругое рассеяние на электронах, фазовое перемешивание траекторий происходит при этом лишь на весьма больших глубинах. При учете ангармонизма запутывание траекторий частиц происходит гораздо быстрее.

В ангармоническом приближении частота осцилляций начинает зависеть от точки входа частицы в канал. При этом «частоты колебаний» вдоль осей  $y, z$  имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \omega &\approx \omega_0 \sqrt{\frac{M}{2E}} \left( 1 + \frac{3}{4} \frac{y_0^2}{b^2} \right), \\ \omega &\approx \omega_0 \sqrt{\frac{M}{2E}} \left( 1 + \frac{3}{4} \frac{z_0^2}{b^2} \right), \end{aligned} \quad (2.30)$$

где

$$\omega_0^2 = \frac{2n\alpha_1}{b^4 M}. \quad (2.30)$$

Поток в аксиальном канале равен

$$\gamma = \iint W dy_0 dz_0. \quad (2.31)$$

В гармоническом приближении поток удастся рассчитать аналитически:

$$\begin{aligned} \gamma = \frac{1}{4 \cos^2 \omega x} &\left[ \Phi \left( \frac{y\omega - \theta_{0y} \sin \omega x + \bar{\omega} \bar{b} \cos \omega x}{\bar{\theta}^2} \right) - \Phi \left( \frac{y\omega - \theta_{0y} \sin \omega x - \bar{\omega} \bar{b} \cos \omega x}{\bar{\theta}^2} \right) \right] \times \\ &\times \left[ \Phi \left( \frac{z\omega - \theta_{0z} \sin \omega x + \bar{\omega} \bar{b} \cos \omega x}{\bar{\theta}^2} \right) - \Phi \left( \frac{z\omega - \theta_{0z} \sin \omega x - \bar{\omega} \bar{b} \cos \omega x}{\bar{\theta}^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.32)$$

где  $\Phi$  — интеграл ошибок,  $\bar{b} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} b$ ;  $\bar{\theta}^2 = \frac{m}{2M} \frac{dE}{dx} \frac{x}{E}$ ,  $\frac{dE}{dx}$  — тормозная способность иона. Как видно из этой формулы, значение потока осциллирует по глубине.

На рис. 7, а показана зависимость относительного потока в центре канала от глубины, вычисленная Ван Флитом на ЭВМ <sup>58</sup>. Как видно,

осцилляции затухают на глубине  $\sim 2000 \text{ \AA}$ , что хорошо согласуется с оценками, приведенными в разделе в), а также с рассчитанными по формуле (2.31).

На глубинах  $\geq 1000 \text{ \AA}$  для частиц с  $E \sim 1 \text{ Мэв}$  распределение потока, даваемое формулой (2.31), практически не отличается от распределения, получаемого в предположении, что имеется равновесное распределение

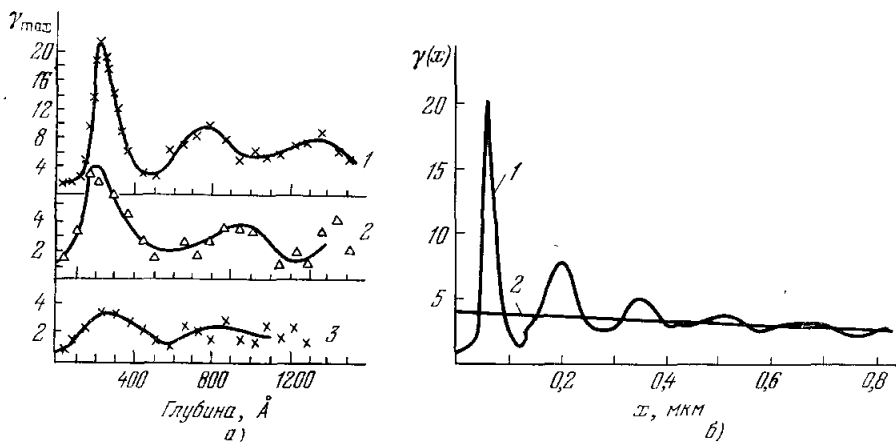


Рис. 7. а) Зависимость максимального потока  $\alpha$ -частиц с  $E = 1 \text{ Мэв}$  в Si от глубины (1 — не учитывается многократное рассеяние; 2 — учитывается многократное рассеяние (расходимость пучка  $\theta = \pm 0,06^\circ$ ); 3 — то же, что и 2, но при  $\theta = \pm 0,23^\circ$  (расчет Ван-Флита на ЭВМ <sup>68</sup>)); б) зависимость относительного потока протонов в центре канала  $\langle 110 \rangle$  в Si ( $E = 700 \text{ кэв}$ ) от  $x$  (1 — расчет по формуле (2.31) с учетом ангармонизма и неупругого рассеяния на электронах; 2 — расчет с помощью решения уравнения (2.24) с предположением наличия статистического равновесия).

в поперечной плоскости, даваемое формулой (2.3). Расчеты выхода ядерной реакции на атомах матрицы, выполненные Рябовым <sup>60</sup> и Барретом <sup>61</sup> дают аналогичные результаты.

На рис. 7, б показан расчет, проведенный с помощью (2.31) (кривая 1). Кривая 2 вычислена с помощью решения (2.24) в предположении, что имеется статистическое равновесие. Видно, что даже без учета расходимости пучка из-за неупругого рассеяния на электронах и ангармонизма фазовое перемешивание наступает после прохождения примерно 1000 атомных слоев.

На рис. 8, 9 приведены результаты расчетов  $\gamma_{\text{max}}$  в зависимости от энергии ионов, ориентации, расходимости ионного пучка, глубины, вида ионов в предположении, что имеет место равновесное распределение.

На рис. 8 приведена зависимость максимального потока в центре канала  $\gamma_{\text{max}}$  от энергии при учете многократного рассеяния на электронах. Как видно,  $\gamma_{\text{max}}$  уменьшается с увеличением глубины. На рисунке показан случай малой расходимости ( $\bar{\theta} = 0,01^\circ$ ). При большей расходимости  $\gamma_{\text{max}}$  будет уменьшаться с энергией, т. е. будет картина, противоположная той, что имеется на рис. 9, где рассмотрен случай, когда  $\theta = 0,1^\circ$ .

Несмотря на то, что площадь  $S_0$ , приходящаяся на канал  $\langle 110 \rangle$  в Si, примерно в 5 раз превосходит площадь канала  $\langle 111 \rangle$ ,  $\gamma_{\text{max}}$  в обоих случаях довольно близки, как это видно из рис. 8. Это просто объясняется тем, что коэффициент  $A$ , который используется для расчета потенциала в канале, пропорционален  $U''(b)$ . Поэтому маленькая площадь компен-

сируется, хотя и неполностью, большим изменением  $U''$  (b) при малых b, т. е. для каналов с малыми  $S_0$ , так как  $S_0 \approx \pi b^2$ .

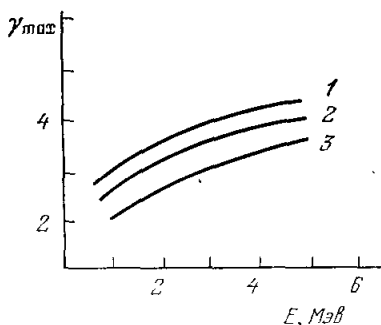


Рис. 8. Зависимость максимального потока от энергии и глубины.  $\alpha$ -частицы в Si ( $\langle 110 \rangle$ ),  $\bar{\theta} = 0,01^\circ$ ,  $x$  (мкм) = 0,1 (1), 0,2 (2) и 0,5 (3).

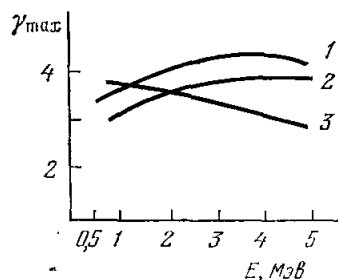


Рис. 9. Энергетическая зависимость максимального потока (Si.  $\alpha$ -частицы).

1 — рассмотрено электронное рассеяние до глубины 0,1 мкм ( $\bar{\theta} = 0,02^\circ$ ,  $\langle 110 \rangle$ ); 2 — то же для  $\langle 111 \rangle$ ; 3 — то же, что и для 1, но при  $\bar{\theta} = 0,1^\circ$ .

На рис. 10, 11 приведены результаты расчетов на ЭВМ Александра и др.<sup>56,57</sup>. Детальное сравнение машинных расчетов на малых глубинах с аналитическим подходом, основан-

ном на представлении о равновесном распределении, приведено в<sup>59</sup>. Отмечается хорошее согласие этих двух подходов.

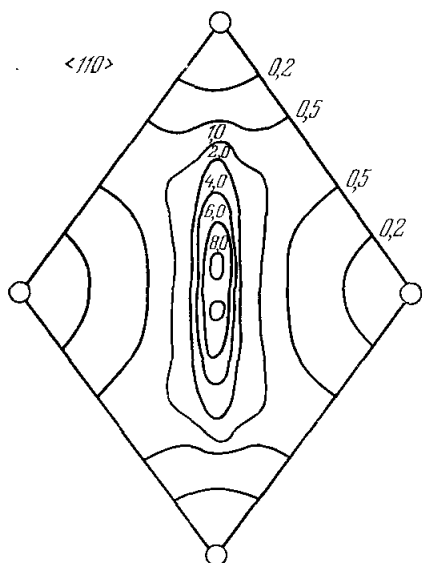


Рис. 10. Контур канала  $\langle 110 \rangle$  в Si с указанием значений потока (расчет Александра на ЭВМ<sup>56</sup>) (в отн. ед.).

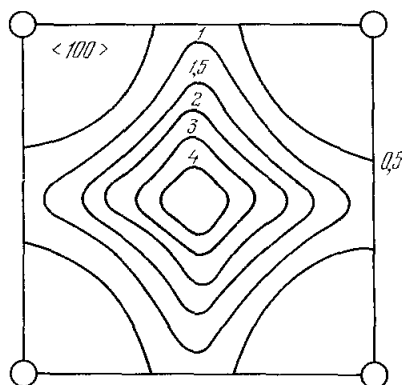


Рис. 11. Контур канала  $\langle 100 \rangle$  меди с указанием значений потока<sup>56</sup> (в отн. ед.).

з) Расщепление углового распределения канализированных ионов и появление многократных пиков. Когда примесный атом локализован на некоторой эквипотенциальной линии  $S_{l_0}$ , ограничивающей площадь  $\bar{S}_{l_0}$ , согласно (2.16) при  $\psi_{ln}^2 = S_{l_0} A / \pi E$  имеет место логарифмическая особенность. Отсюда видно, что в угловом распределении  $\gamma$  ( $\psi_{ln}$ ) возможно появление двойного пика<sup>38,62</sup>.

Появление логарифмической особенности можно понять следующим образом. При  $\psi_{in} = 0$  для части ионов эквипотенциаль  $\bar{S}_{i_0}$  является недоступной. При  $\psi_{in}^2 = S_{i_0}A/\pi E$  эта эквипотенциаль доступна для всех ионов. Если  $\psi_{in}$  превысит это значение, доступные области ионов увеличатся, так что поток на линии  $\bar{S}_{i_0}$  при этом будет меньше, чем при  $\psi_{in}^2 = S_{i_0}A/\pi E$ . Таким образом, при  $\psi_{in}^2 = S_{i_0}A/\pi E$  поток на линии  $\bar{S}_{i_0}$  будет иметь значение, близкое к максимальному.

Определив экспериментальное значение  $\psi_{in}$ , при котором появляется пик, можно определить значение  $S_{i_0}$ , т. е. местоположение примесного

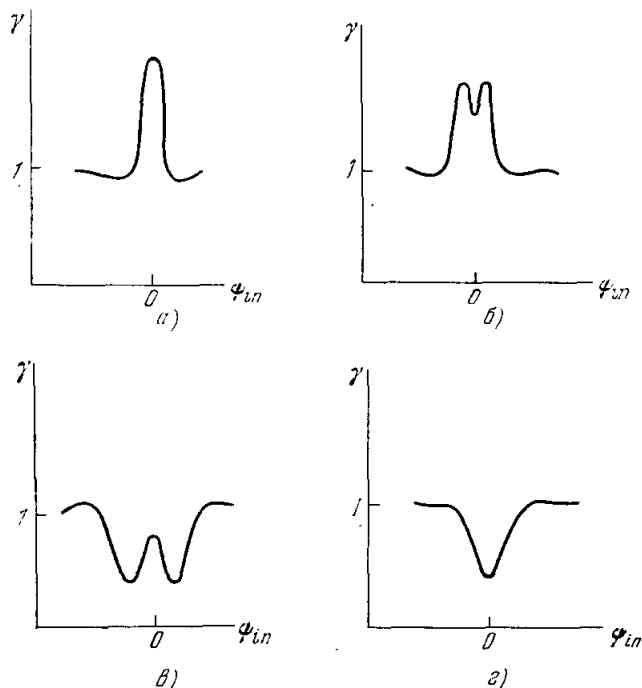


Рис. 12. Схематическое изображение зависимости потока от начального угла падения ионного пучка.

а) Примесный атом в центре канала; б) примесные атомы в центральной части канала, но не точно в центре; в) часть примесных атомов в центре канала, а остальная часть — в замещающем состоянии; г) примесные атомы локализованы в периферийной части канала вблизи атомной цепочки.

атома. Таким образом, угловое распределение каналированных ионов несет информацию о местоположении примесных атомов. Рассмотрим несколько случаев, представляющих интерес<sup>38,59</sup>.

Если примесный атом локализован в центре канала, распределение характеризуется максимумом при  $\psi_{in} = 0$  (рис. 12, а).

Если примесные атомы локализованы в центральной части канала на некоторой эквипотенциали  $\bar{S}_i$ , то появится двойной пик (схематически это показано на рис. 12, б).

Если часть примесных атомов локализована в центре канала, а другая часть — в центральной части канала, то появится тройной пик.

Если часть примесных атомов локализована в центре канала, а другая часть находится в замещающем состоянии, то максимум будет при  $\psi_{in} = 0$ , однако высота максимума может и не превосходить нормальный уровень (см. рис. 12, г). Высота пиков зависит не только от положения

примесного атома, но и от того, какая часть примесных атомов занимает данное положение.

Если примесные атомы локализованы в периферийной части канала, максимум заменится минимумом (рис. 12, *г*), однако полуширина этого минимума меньше, чем критический угол.

Все эти особенности видны также на рис. 6, где проведен точный расчет.

При учете конечной расходимости пучка логарифмическая особенность в (2.16) исчезает и значение  $\gamma$  при этом дается формулой<sup>37</sup>

$$\gamma = \ln \left| \frac{S_0}{S_{i0} 2\psi_{in}(\theta)} \right|. \quad (2.33)$$

Недавно Александер и др.<sup>59,62</sup> наблюдали многократный пик в Fe, легированном ионами Вг. Расщепление углового распределения и появ-

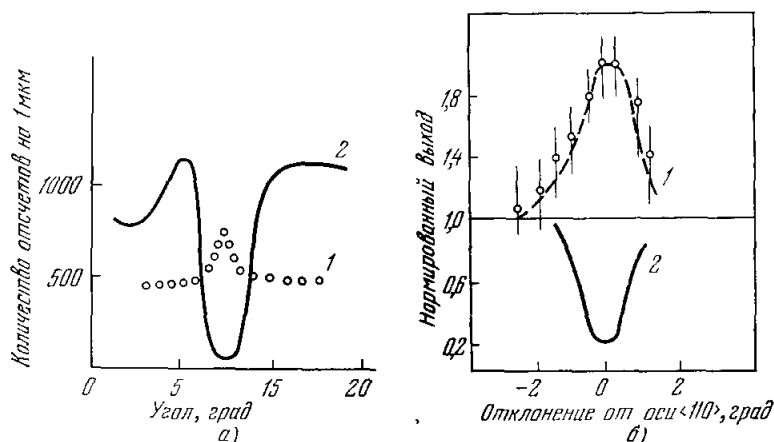


Рис. 13. Эффект увеличения выхода на ядерных реакциях.

*а*) Увеличение выхода протонов в реакции  $H^2(d, p)H^3$  (1) и выход на атомах матрицы в ниобии (2) (эксперимент Иферова, Похила и Тулинова<sup>63а</sup>); *б*) увеличение выхода  $\alpha$ -частиц в реакции  $Li^7(p, \alpha)He^4$  (1) и выход на атомах матрицы в Si (2) (эксперимент Андерсена, Уггерхоя и Гибсона<sup>63б</sup>).

ление многократных пиков имеет важное значение, так как существенно облегчает интерпретацию экспериментов по определению местоположения примесного атома.

Как указывалось выше, если примесный атом локализован в центре канала, то при  $\psi_{in} = 0$  появится пик в угловом распределении. Увеличение выхода экспериментально наблюдалось в<sup>34,56,63-68</sup>. На рис. 13 показано увеличение выхода на ядерных реакциях, которое впервые наблюдалось в<sup>63</sup>.

Теоретическая интерпретация эффекта увеличения выхода, основанная на теории перераспределения потока ионов, была дана в работе<sup>33</sup> (см. также<sup>34,35,37</sup>), а также в работе<sup>36</sup>. Машинные расчеты, выполненные примерно в это же время<sup>55,56-59</sup>, также показывают возможность увеличения выхода. В работах<sup>34-37</sup> и<sup>55,56-59</sup> было указано на возможность использования эффекта перераспределения потока ионов для точного определения местоположения примесного атома, находящегося в междоузельном положении. В принципе возможно также получить информацию об амплитуде теплового колебания примесного атома<sup>33</sup>.

Попытка получить информацию о величине  $u_{\perp i}$  — амплитуде теплового колебания примесного атома, находящегося в замещающем положении, с помощью измерения угловых полуширин  $\psi_{1/2}$  и  $\psi_{1/2}$ ,  $i$  на атомах матрицы и примеси предпринималась Александром<sup>86</sup>.

### 3. ЭФФЕКТ ПРОСТРАНСТВЕННОГО ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОТОКА ИОНОВ ПРИ ПЛОСКОСТНОМ КАНАЛИРОВАНИИ

а) Поток ионов в плоскостном канале. Каналирование имеет место, как известно<sup>18</sup>, не только когда начальный импульс частиц параллелен главным кристаллографическим осям, но и в том случае, когда начальный импульс параллелен главным атомным плоскостям. Это так называемое плоскостное каналирование. Как и при аксиальном каналировании, отвлечемся от рассмотрения движения частицы вдоль плоскостей, т. е. по глубине, и рассмотрим лишь движение в плоскости, перпендикулярной продольному импульсу частицы, т. е. рассмотрим одномерное движение между двумя плоскостями.

Равновесное распределение при одномерном движении (которое обозначим как  $\bar{f}(E_{\perp}, y)$ ) отличается существенно от двумерного случая, рассмотренного в разделе а) гл. 2.

Если наблюдать за движением частицы в течение времени  $t \gg T$  ( $T$  — период движения между двумя плоскостями), то

$$\bar{f}(E_{\perp}, y) = \begin{cases} \frac{2 dt}{dy} \frac{1}{T(E_{\perp})} = \frac{\sqrt{2M}}{T(E_{\perp}) \sqrt{E_{\perp} - Y(y)}}, & E_{\perp} > Y(y), \\ 0, & E_{\perp} < Y(y); \end{cases} \quad (3.1)$$

здесь  $Y(y)$  — потенциал плоскости,  $y$  отсчитывается от плоскости. Заметим, что распределение (3.1) можно также получить как решение уравнения непрерывности в фазовом пространстве:

$$v_y \nabla_y \bar{f} + \frac{F}{M} \nabla_{v_y} \bar{f} = 0, \quad (3.2)$$

где  $\frac{Mv_y^2}{2} = E_{\perp}$ . Как видно из (3.1), в отличие от двумерного случая, частица большую часть времени проводит вблизи точки поворота, как бы «зависает» над плоскостью.

Пусть единственный поток ионов входит параллельно в один плоскостной канал. Найдем поток ионов на некотором расстоянии  $z$  от середины между двумя плоскостями, когда устанавливается равновесное распределение (3.1).

Очевидно, этот поток равен

$$\gamma(z) = \frac{2}{d_p} \int_z^l \bar{f}(E_{\perp}, z) dz_1, \quad (3.3)$$

где  $Y(z_1) = E_{\perp}$ ,  $d_p$  — расстояние между атомными плоскостями ( $l = d_p/2$ ),  $z = l - y$ .

Чтобы получить простую аналитическую формулу для потока, потенциал в плоскостном канале можно принять гармоническим. При детальном рассмотрении следует учесть также ангармонический член. Если в качестве ион-атомного потенциала использовать потенциал Мольера, то потенциал  $Y(z)$  с учетом обеих плоскостей можно записать в виде

$$Y(z) = \frac{V_0 b_1^2}{2} \left( z^2 + \frac{b_1^2 z^4}{12} \right), \quad (3.4)$$

где

$$V_0 = 0,35 \frac{8\pi N z_1 z_2 e^2 l}{b_1} \exp\left(-\frac{b_1 l}{l}\right), \quad b_1 = \frac{0,3}{a}.$$

В приближении, когда учитывается лишь гармоническая часть потенциала (3.4),

$$\bar{f}(E_{\perp}, z) = \begin{cases} \frac{\sqrt{V_0 b_1^2/2}}{\pi \sqrt{E_{\perp} - (V_0 b_1^2/2) z^2}}, & E_{\perp} > \frac{V_0 b_1^2}{2} z^2, \\ 0, & E_{\perp} < \frac{V_0 b_1^2}{2} z^2. \end{cases} \quad (3.5)$$

Тогда поток в канале,  $\gamma(z)$ , равен

$$\gamma(z) = \frac{2}{\pi} \ln \left| \frac{l}{z} + \sqrt{\left(\frac{l}{z}\right)^2 - 1} \right|. \quad (3.6)$$

Отсюда видно, что в центральной части канала, при  $(l/z) \gg 1$ ,  $\gamma > 1$ , т. е. поток в центре канала выше нормального.

Распределение потока в канале, описываемое формулой (3.6), изображено на рис. 14. Как видно из рисунка, в периферийной части канала, вблизи атомной плоскости, относительный поток существенно меньше 1.

Случай наклонного пучка, когда в угловых распределениях могут возникать пики, а также влияние расходимости пучка на значение потока рассматривались в работе<sup>37</sup>.

Оценки, сделанные выше, справедливы лишь на тех глубинах, когда  $t \gg T$ , т. е. когда частица совершает по крайней мере несколько колебаний между двумя плоскостями. При исследовании приповерхностных слоев желательно более точно рассчитывать поток, без использования равновесного распределения (3.1). Такая необходимость возникает, например, в случае, когда энергетическое разрешение детектора позволяет анализировать очень тонкие приповерхностные слои кристалла.

Так же как и в разделе ж) гл. 2, для решения этой задачи можно использовать аналогию между броуновской частицей и каналированным ионом, предполагая, что распределение валентных электронов, на которых происходит рассеяние ионов, является однородным.

На основе решения кинетического уравнения Фоккера — Планка можно найти вероятность  $W(z_0, z, \theta_0, x)$  того, что ион будет находиться в точке с координатой  $z$  на глубине  $x$ , если при  $x = 0$  ион входит в канал под углом  $\theta_0$  на расстоянии  $z_0$  от середины канала. Эта вероятность выражается формулой<sup>54</sup>

$$W(z_0, z, \theta_0, x) = \frac{\omega}{\sqrt{\pi \bar{\theta}^2}} \exp\left[-\frac{1}{\bar{\theta}^2} (z\omega - z_0\omega \cos \omega x - \theta_0 \sin \omega x)^2\right]. \quad (3.7)$$

Когда используется гармонический потенциал,  $\omega = \omega_0 \sqrt{\frac{M}{2E}}$ ,  $\omega_0^2 = \frac{v_0 b_1^2}{M}$ ;  $\bar{\theta}^2$  — среднеквадратичный угол рассеяния на электронах после прохождения глубины  $x$ :  $\bar{\theta}^2 \approx \frac{m}{2M} \frac{dE}{dx} \frac{x}{E}$ ;  $\frac{dE}{dx}$  — тормозная способность иона.

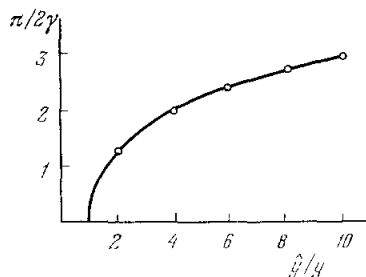


Рис. 14. Распределение потока ионов в плоскостном канале.

При учете ангармонизма  $\omega$  начинает зависеть от начальной координаты  $z_0$ :

$$\omega \approx \omega_0 \sqrt{\frac{M}{2E}} \left( 1 + \frac{3}{8} \frac{b_1^2}{6} z_0^2 \right). \quad (3.8)$$

Относительный поток  $\gamma(z, x)$  в зависимости от глубины дается, очевидно, формулой

$$\gamma(x, z) = \int_{-l}^l W dz_0. \quad (3.9)$$

Для гармонического потенциала при этом получается простая формула

$$\gamma = \frac{1}{2 \cos \omega x} \left[ \Phi \left( \frac{z\omega - \theta_0 \sin \omega x + l\omega \cos \omega x}{\theta^2} \right) - \Phi \left( \frac{z\omega - \theta_0 \sin \omega x - l\omega \cos \omega x}{\theta^2} \right) \right]. \quad (3.10)$$

Отсюда видно, что поток осциллирует с глубиной. Максимальный поток в центре канала (т. е. при  $z = 0$ ), когда пучок падает на кристалл параллельно рассматриваемой плоскости, имеет значение

$$\gamma_{\max}(x) = \frac{1}{\cos \omega x} \Phi \left( \frac{l\omega \cos \omega x}{\theta^2} \right). \quad (3.11)$$

Используя простые формулы (3.9)–(3.11), можно проводить интерпретацию экспериментов вблизи поверхности.

б) Многократное рассеяние каналированных ионов при плоском каналировании. Между аксиальным и плоскостным каналированием имеется важное различие, в силу того что при движении вдоль плоскости под большим углом к кристаллографическим осям последовательные столкновения в отличие от аксиального случая происходят с самыми различными прицельными параметрами. Поэтому ядерное рассеяние кроме направляющего действия оказывает, в противоположность аксиальному каналированию, существенное влияние на диффузию частиц по поперечной энергии даже при выключении из рассмотрения тепловых колебаний.

В работах <sup>48, 69</sup> было получено уравнение типа Фоккера — Планка при плоскостном каналировании. Если пренебречь изменением полной энергии, то уравнение имеет вид

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial E_{\perp}} \left[ \left\langle \frac{\Delta E_{\perp}^2}{\Delta x} \right\rangle T \frac{\partial}{\partial E_{\perp}} \left( \frac{F}{T} \right) \right], \quad (3.12)$$

где  $x$  — глубина,  $E_{\perp}$  — поперечная энергия,  $T$  — период движения частицы в канале. Во многих приложениях удобно использовать следующее соотношение:

$$T \left\langle \frac{\Delta E_{\perp}}{\Delta x} \right\rangle = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial E_{\perp}} \left( T \left\langle \frac{\Delta E_{\perp}^2}{\Delta x} \right\rangle \right). \quad (3.13)$$

В формулах (3.4)–(3.5) угловые скобки означают усреднение по периоду колебания частицы:

$$\langle X \rangle = \frac{4}{T} \int \frac{X dy}{\sqrt{(E_{\perp} - Y) 2/M}}, \quad (3.14)$$

где  $Y$  — плоскостной потенциал. В ряде случаев решение уравнения (3.12) можно получить в явном виде <sup>48</sup>. В табл. I приведен расчет глубин  $x_{1/2}$ , на которых число частиц в канале уменьшается вдвое. Эти значения были получены в результате решения уравнения (3.12).

Таблица I  
Глубина  $x_{1/2}$  (мкм), на которой половина  
канализованного пучка протонов  
в вольфраме покидает канал

Направление (плоскость)	Энергия, Мэв	$x_{1/2}$ , мкм	
		теория	эксперимент <sup>70</sup>
{100}	2	1,5	1,3
	3	2,2	2,8
	6	4,4	4,0
{111}	2	2,6	2,7
	3	3,9	4,1
	6	7,8	8,8

Как видно, имеется хорошее согласие между теорией и экспериментом <sup>70</sup>. Отсюда можно сделать вывод, что расчет  $X_{1/2}$  может служить хорошей оценкой для теоретического предсказания этой величины при постановке эксперимента.

#### 4. КАНАЛИРОВАНИЕ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ

а) О некоторых особенностях канализования тяжелых ионов. Как указывалось в разделе е) гл. 2, при  $(M/t)\psi_1^2 > 1$  уменьшение поперечной энергии, связанное с торможением, превысит увеличение поперечной энергии, связанное с рассеянием на электронах. Условие  $(M/t)\psi_1^2 > 1$  выполняется при не очень больших скоростях для тяжелых частиц. Например, в Si при канализовании протонов это условие выполняется уже при энергиях порядка 0,1 Мэв и ниже. С уменьшением поперечной энергии уменьшается доступная область  $S(E_{\perp})$ . Это приводит к тому, что с увеличением глубины поток в центре канала увеличивается, а не уменьшается, как это имеет место для быстрых легких частиц. На рис. 15 приведен расчет потока для дейтронов с  $E = 300$  кэв, выполненный на ЭВМ <sup>66, 67</sup>. Как видно, с увеличением глубины поток увеличивается. Видно, что вблизи поверхности, когда еще не устанавливается статистическое равновесное распределение, поток осциллирует по глубине.

Некоторая часть ионов с большими поперечными энергиями деканализует из-за рассеяния на ядрах решетки, испытывающих тепловые колебания. Таким образом, канализованный пучок расщепляется на две компоненты <sup>48</sup>. Ионы с малыми  $E_{\perp}$  из-за торможения на электронах фокусируются к оси канала, а ионы с большими  $E_{\perp}$  покидают канал. В среднем пробегут у тех и других ионов могут сильно отличаться. Это приводит к тому, что профиль внедренных ионов в условиях канализования очень сильно отличается от профиля в аморфной среде.

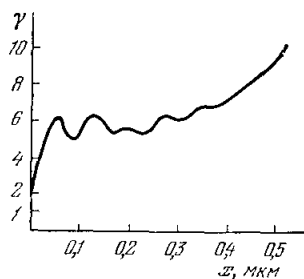


Рис. 15. Зависимость потока от глубины для дейтронов с  $E = 300$  кэв в вольфраме <sup>66, 67</sup>.

Вопрос о пространственном распределении внедренных ионов в кристаллах в последнее время привлекает большой интерес в связи с широким использованием техники ионной имплантации проводников. Имеется большое число работ, посвященных этому вопросу<sup>71-98</sup>. Особенности каналирования тяжелых ионов четко выявляются при рассмотрении вопроса о пространственном распределении этих ионов. Ниже кратко рассматривается этот вопрос.

б) Пространственное распределение тяжелых каналированных ионов. При расчете профиля внедренных ионов в аморфной среде (т. е. без учета каналирования) достаточно знать проективный пробег и страгглинг. В кристалле при учете каналирования положение существенно усложняется. Как увидим, профиль зависит от очень большого числа параметров. Для упрощения расчетов вводится ряд предположений:

1) Если ион имеет поперечную энергию ниже критической энергии Линдхарда, то ион считается каналированным.

2) Если ион имеет энергию выше критической, то предполагается, что ион принадлежит хаотической части пучка.

3) Обратный захват иона в канал не учитывается.

4) Кристалл считается идеальным — т. е. рассеянием ионов на вводимых при легировании дефектах пренебрегается.

4) Используется предположение о монотонном увеличении поперечной энергии, т. е. диффузия в пространстве поперечных импульсов не учитывается.<sup>1</sup>

Изменение поперечной энергии  $\varepsilon_{\perp}$  при рассматриваемых скоростях  $v \leq v_0 = 2,2 \cdot 10^8$  см/сек обусловлено в основном электронным торможением  $\left(\frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta x}\right)_e$  и рассеянием  $\left(\frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta x}\right)_s$ , а также рассеянием на тепловых колебаниях,  $\left(\frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta x}\right)_{th}$ , т. е.

$$\left\langle \frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta x} \right\rangle = \left\langle \frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta x} \right\rangle_e + \left\langle \frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta x} \right\rangle_{th} + \left\langle \frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta x} \right\rangle_s; \quad (4.1)$$

здесь скобки  $\langle \dots \rangle$  обозначают усреднение по доступной области. Обычно последний член в (4.1) существенно меньше, чем два первых. Для быстрых легких частиц, как известно, преобладает последний член. Уравнение (4.1) решалось в двух приближениях<sup>48</sup>. В первом случае, который будем называть приближением прямоугольной ямы, предполагается, что средняя кинетическая поперечная энергия равна общей поперечной энергии, т. е.

$$\left\langle \frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta x} \right\rangle_e = \frac{\varepsilon_{\perp}}{E} \left\langle \frac{\Delta E}{\Delta x} \right\rangle. \quad (4.2)$$

где  $\langle \Delta E / \Delta x \rangle$  — изменение полной энергии. Во втором приближении, когда потенциал в канале считается гармоническим, в соответствии с теоремой вириала

$$\left\langle \frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta x} \right\rangle = \frac{1}{2} \frac{\varepsilon_{\perp}}{E} \left\langle \frac{\Delta E}{\Delta x} \right\rangle. \quad (4.3)$$

Для величин  $\langle \Delta \varepsilon_{\perp} / \Delta x \rangle_{th}$  и  $\langle \Delta \varepsilon_{\perp} / \Delta x \rangle_s$  используются формулы Линдхарда<sup>18</sup>. При этом

$$\left\langle \frac{\Delta \varepsilon_{\perp}}{\Delta x} \right\rangle_s = \frac{d \sqrt{5 m v^2 \hbar \omega_p}}{4 E Z_1 Z_2 e^2} \left\langle \frac{\Delta E}{\Delta x} \right\rangle. \quad (4.4)$$

В приближении прямоугольной ямы для потенциала уравнение (4.1) можно переписать в виде

$$\left\langle \frac{d\varepsilon_{\perp}}{dE} \right\rangle = \frac{\varepsilon_{\perp}}{E} + \left\langle \frac{d\varepsilon_{\perp}}{dx} \right\rangle_{\text{th}} \left\langle \frac{dE(E_{\perp})^{-1}}{dx} \right\rangle + \frac{d\sqrt{5mv^2\hbar\omega_p}}{4EZ_1Z_2e^2} \quad (4.5)$$

В гармоническом приближении первый член справа в (4.5) заменяется на  $\varepsilon_{\perp}/2E$ . Уравнение (4.5) решается на ЭВМ по методу, аналогичному тому, который использовался в <sup>48</sup>. Метод дает возможность исследовать влияние основных факторов, от которых зависит профиль каналированных ионов: изучить влияние аморфного слоя, который обычно покрывает поверхность кристалла, ориентационную и температурную зависимость, зависимость профиля от начального угла падения ионного пучка и энергии и т. д.

На рис. 16 изображена энергетическая зависимость профиля для ионов бора, каналированных вдоль  $\langle 111 \rangle$  в Si при комнатной температуре. Как видно, с увеличением энергии доля ионов, попадающих в канал при

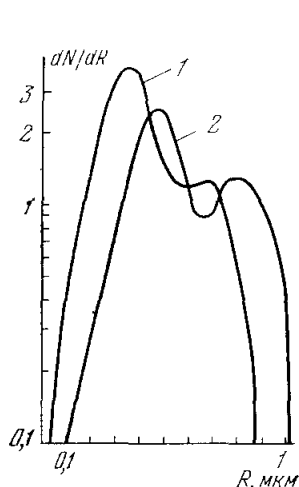


Рис. 16. Энергетическая зависимость профиля для ионов бора в направлении  $\langle 111 \rangle$  в Si. 1 —  $E = 100$  кэВ, 2 —  $E = 150$  кэВ. Толщина аморфного слоя  $\Delta x = 50$  Å.

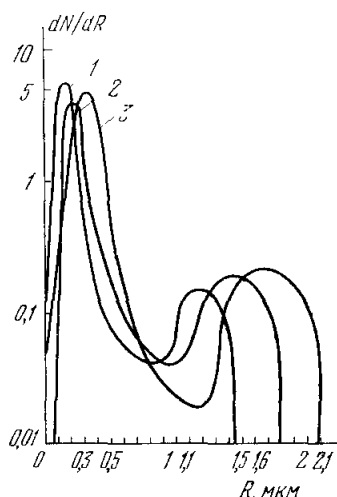


Рис. 17. Зависимость профиля ионов Р от энергии в Si ( $\langle 110 \rangle$ ,  $t = 25$  °C).  $E_0$  (кэВ) = 100 (1), 150 (2) и 200 (3).  $\Delta x = 50$  Å.

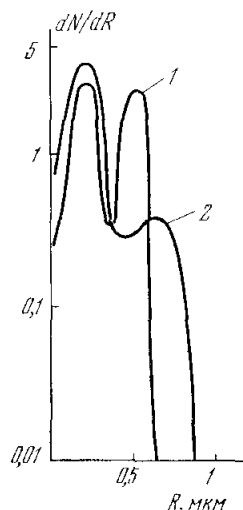


Рис. 18. Зависимость профиля ионов бора с  $E = 50$  кэВ в кремнии от ориентации (1 —  $\langle 111 \rangle$ ,  $\Delta x = 20$  Å; 2 —  $\langle 110 \rangle$ ,  $\Delta x = 100$  Å).

данном значении толщины  $\Delta x$  аморфной пленки, покрывающей поверхность, увеличивается. Кроме того, увеличивается глубина и первого и второго максимумов.

На рис. 17 изображена энергетическая зависимость для ионов фосфора.

На рис. 18 показана ориентационная зависимость профиля для ионов бора с  $E = 50$  кэВ.

Как видно, в направлении  $\langle 110 \rangle$  пробег каналированных ионов существенно больше, чем в направлении  $\langle 111 \rangle$ . Это также подтверждается экспериментами <sup>74</sup>.

Имеется большое различие в профилях для ионов В и Р при всех равных условиях. Это объясняется тем, что пробег ионов бора в аморфной среде и в канале не столь сильно различается, как в случае фосфора.

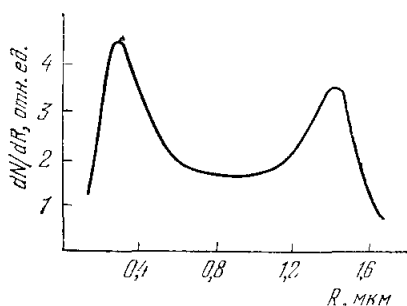


Рис. 19. Профиль ионов Р в Si, полученный экспериментально <sup>71</sup>.

Поэтому первый и второй максимум для ионов бора экспериментально различить гораздо труднее, чем в случае ионов фосфора.

Это обстоятельство усугубляется также тем, что рассеяние на тепловых колебаниях для ионов бора слабее, чем для ионов фосфора. Поэтому глубина провала между первым и вторым максимумом для ионов бора существенно меньше, чем для ионов фосфора. Чем тяжелее ион, тем более отчетливо должен выявиться провал между первым и вторым максимумом. На рис. 19 показан экспериментальный профиль для ионов Р, полученный Дирилеем и др. <sup>71</sup>. Как видно, имеются два четко выраженных максимума. Максимальные пробеги каналированных ионов можно рассчитать, используя теоретические оценки для энергетических потерь в зависимости от прицельного параметра <sup>96-97</sup>.

## 5. ЭКСПЕРИМЕНТЫ ПО ОПРЕДЕЛЕНИЮ МЕСТОПОЛОЖЕНИЯ ПРИМЕСНОГО АТОМА

а) Основные факторы, влияющие на местоположение примесного атома. Когда примесные атомы вводятся в решетку с помощью диффузии, они обычно замещают атомы матрицы. При ионном легировании, которое здесь рассматривается, положение изменяется. Ионное легирование представляет собой существенно неравновесный процесс. При легировании создаются радиационные дефекты (пары Френкеля), области разупорядочения и т. д. Вследствие этого при легировании примесные атомы могут занимать различные положения в решетке. Рассмотрим ряд факторов, от которых может зависеть местоположение примесного атома, внедренного в кристалл с помощью легирования.

В процессе остановки иона в кристалле вдоль трека создается достаточно большое число смещенных атомов и вакансий. Ион может взаимодействовать с вакансией и занять замещающее положение.

В принципе возможна также такая ситуация, когда примесный атом еще до остановки выбивает из узла атом матрицы, теряя при этом кинетическую энергию и остается на месте этого атома.

Примесный атом может стать замещающим также при отжиге областей разупорядочения.

Примесные атомы могут также занимать междоузельное положение. В кремнии, например, одним из таких положений является тетраэдральное междоузельное положение. Имеется несколько каналов, по которым может произойти переход примесного атома в междоузельное положение. Это, например, может иметь место при непосредственном взаимодействии атома матрицы с примесным атомом, находящимся в замещающем состоянии <sup>28</sup>. В результате атом матрицы занимает свое положение, а примесный атом — междоузельное. Кроме того, может иметь место просто переход примесного атома в тетраэдральное междоузелье, в результате чего происходит образование вакансий и заполнение тетраэдрального междоузелья.

Эта реакция экспериментально наблюдалась для ионов талия, легированных в кремнии<sup>26</sup>.

Примесные атомы могут занимать и другие положения. Дислокация и другие несовершенства могут служить естественным стоком для примесных атомов. Они могут выйти также на поверхность кристалла.

Детальный анализ экспериментов, проведенных до 1970 г., содержится в книге Мейера, Эриксона и Дэвиса<sup>26</sup>. Количественная, а в ряде случаев и качественная интерпретация этих экспериментов не является достаточно удовлетворительной, так как в этих работах не учитывался эффект перераспределения потока ионов. Тем не менее можно указать на некоторые факторы, основные закономерности, которые наблюдаются экспериментально. Доза облучения и температура, при которой производится легирование, существенно влияют на местоположение примесного атома. Имеет место также зависимость от температуры отжига.

Имеется определенная корреляция между долей ионов, находящихся в замещающем состоянии, от числа радиационных дефектов и температуры<sup>26</sup>.

В табл. II приведен перечень основных экспериментов, проведенных до 1970 г. в кремнии<sup>99-116</sup>.

Таблица II

Эксперименты по определению местоположения примесного атома в кремнии

Внедренный ион	Методика эксперимента	Литература
Li	( $p$ , $\alpha$ )-реакция	99
B	( $p$ , $\alpha$ )-реакция	100-103
P	$\beta$ -эмиссия	99
Ga	Обратное рассеяние	104, 105, 106-108
As	То же	100, 106-107
Cd	» »	109, 106
In	» »	100, 106, 110
Sn	» »	106
Sb	» »	100, 104, 106, 107, 111
Sb	Эмиссия X-лучей	112
Tl	Обратное рассеяние	109, 106
Xe	То же	110
Cs	» »	106
Tm	» »	113
Yb	$\beta$ -эмиссия	114
Tl	Обратное рассеяние	100, 110, 115
Bi	То же	106, 116

Поведение примесного атома в решетке также зависит от его зарядового состояния. Поэтому элементы различных групп таблицы Менделеева ведут себя по-разному. Элементы IV и V групп, в основном занимают в кремнии замещающее положение<sup>26</sup>, а элементы II группы занимают, в основном, междоузельные тетраэдральные положения. Мы рассмотрим подробно ряд новых экспериментов, при интерпретации которых учитывался эффект перераспределения потока каналированных частиц.

б) Использование эффекта перераспределения потока для точного определения местоположения примесного атома. В работе Домея, Флады и Юхансона<sup>65</sup> определялось местоположение ионов Zr, Hf, Tl, Hg в кремнии. Измерения проводились с помощью пучка ионов углерода с энер-

гией 1,8 Мэв. Авторы<sup>65</sup> обнаружили увеличение выхода в направлении  $\langle 110 \rangle$ , когда измерялся выход на ионах Zr (рис. 20). В то же время при облучении вдоль направления  $\langle 111 \rangle$  наблюдался обычный минимум. Это позволило авторам<sup>65</sup> доказать, что ионы циркония локализованы в тетраэдральных междоузлиях. Действительно, при облучении вдоль  $\langle 111 \rangle$

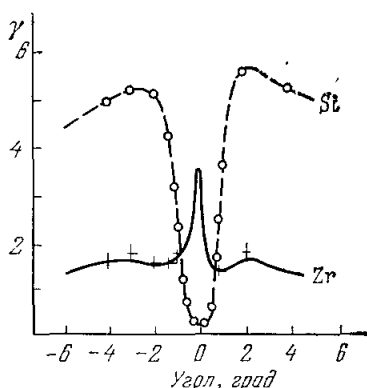


Рис. 20. Зависимость выхода на атомах матрицы Si и примесных атомах Zr от внешнего угла (эксперимент Домея, Фладды и Юханссона<sup>65</sup>).

тетраэдральные междоузлия затеняются атомной цепочкой  $\langle 111 \rangle$ . В то же время вдоль  $\langle 110 \rangle$  они лежат в центральной части канала (см. рис. 1, а) и выход  $\gamma$  близок к 2,3 (рис. 1, б). В работе<sup>65</sup> выход оказался равным 2,2.

При изменении выхода на ионах таллия (Tl) был обнаружен минимум с небольшим пиком в центре вдоль оси  $\langle 110 \rangle$  (рис. 21). Выход вдоль  $\langle 111 \rangle$  был незначителен. Это дало возможность авторам<sup>65</sup> доказать, что часть атомов Tl занимает тетраэдральное положение, а остальная часть находится в замещающем состоянии. Согласно теоретической модели (см. рис. 12) при той ситуации, которая наблюдалась для таллия в<sup>65</sup>, часть атомов находится в замещающем состоянии, а часть локализована в междоузельном положении. Так как вдоль  $\langle 111 \rangle$  наблюдается минимум, междоузельное положение для ионов таллия соответствует тетраэдральному. Более того, так как выход для ионов таллия близок к 1 вдоль  $\langle 110 \rangle$  (если бы все ионы таллия были бы локализованы в тетраэдральном междоузлии, выход  $\gamma$ , согласно рис. 16, должен был быть близок к 2), можно оценить, что доля ионов, находящихся в тетраэдральном положении, близка к 1/2, а остальная половина находится в замещающем состоянии.

В работе Карстанена и Зицмана<sup>67</sup> определялось местоположение атомов дейтерия в ниобии с помощью ядерной реакции  $D(d, p)T$ . Температура мишени была 150 °К. Начальная энергия пучка была 300 кэв. Из общих термодинамических соображений известно, что в решетке ниобия могут существовать тетраэдральные, октаэдральные и гексагональные междоузельные положения. Был проведен теоретический расчет потока ионов для всех указанных положений. Результаты расчетов указаны на рис. 22 сплошными линиями. Затем был проведен сам эксперимент. Как видно из рис. 22, результат эксперимента совпадает с теорией лишь в случае, если дейтерий находится в тетраэдральных междоузлиях. Из этого факта авторы<sup>67</sup> делают вывод, что атомы дейтерия в ниобии располагаются в тетраэдральных междоузлиях. Интересно отметить, что этот результат подтверждается экспериментом Соменкова и др.<sup>117</sup> по нейтронной дифракции. На примере эксперимента Карстанена и Зицмана<sup>67</sup> видно, как важна теория перераспределения потока для интерпретации экспериментов по определению местоположения примесного атома.

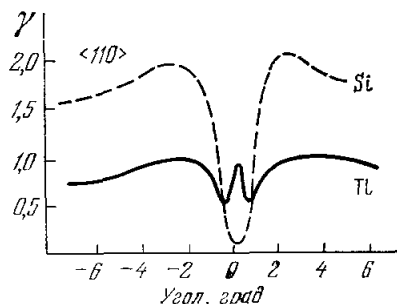


Рис. 21. Выход для ионов таллия<sup>65</sup>.

В работе Андерсена и др.<sup>36</sup> определялось местоположение атомов иттербия Yb, внедренных в кремний. Использовался пучок  $\alpha$ -частиц с энергией 1 Мэв. На рис. 23 показан результат эксперимента вдоль трех главных осей. Для объяснения эксперимента авторы<sup>36</sup> рассмотрели две возможности: 1) Часть атомов Yb (30%) локализована в тетраэдральных междоузлиях, а остальная часть атомов смещена достаточно далеко от

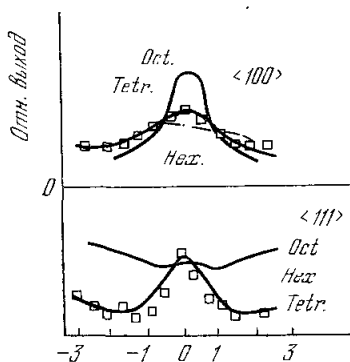


Рис. 22. Результат эксперимента Карстанена и Цицмана<sup>36</sup>. Сплошные кривые — результат расчета потока на ЭВМ.

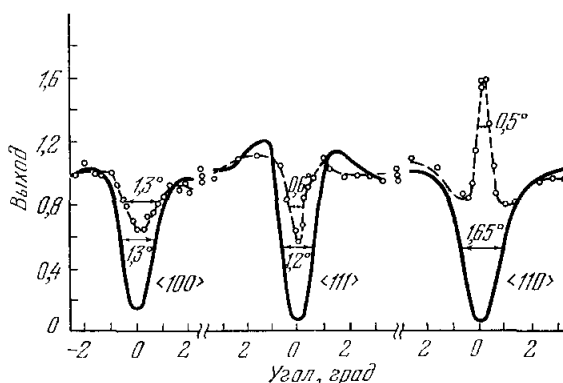


Рис. 23. Результат эксперимента Андерсена и др.<sup>36</sup> по определению местоположения Yb в Si. Выход — в отн. ед.

осей  $\langle 110 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$  и поэтому не дает существенного уменьшения в выходе, 2) Все атомы Yb локализованы в одном междоузельном положении, которое не соответствует обычному тетраэдральному междоузлию. Если бы атомы Yb были локализованы в тетраэдральных междоузлиях, они должны были дать очень маленький выход вдоль  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 100 \rangle$ , так как вдоль

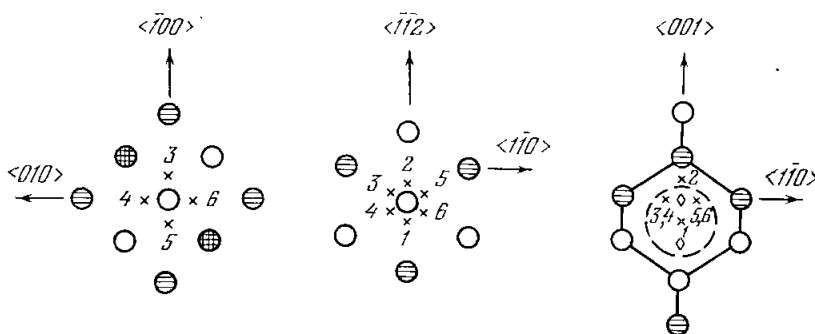


Рис. 24. Положение атомов Yb в Si вдоль главных осевых каналов в Si.

этих рядов это положение затеняется. Из этого факта Андерсен и др.<sup>36</sup> приходят к выводу, что треть атомов лежит вдоль эквивалентных осей  $\langle 100 \rangle$ , а остальные смещены на 0,68 Å от этих осей (рис. 24).

На рис. 24 показаны положения атомов Yb вдоль главных осей. Как видно, вдоль оси  $\langle 110 \rangle$  5/6 атомов Yb лежит в центральной части канала. Поэтому вдоль этой оси наблюдается увеличение выхода.

В работе Эйзена и Уггерхоя<sup>68</sup> был повторен эксперимент Андерсена и др.<sup>36</sup>. На рис. 25 показан результат Эйзена и Уггерхоя<sup>68</sup>. В отличие

от работы Андерсена и др.<sup>36</sup>, в работе<sup>68</sup> полуширина выхода на атомах Yb не равна полуширине выхода на атомах Si, т. е. на атомах матрицы. Поэтому Эйзен и Уггерхой<sup>68</sup> делают предположения, что атомы Yb могут в ряде

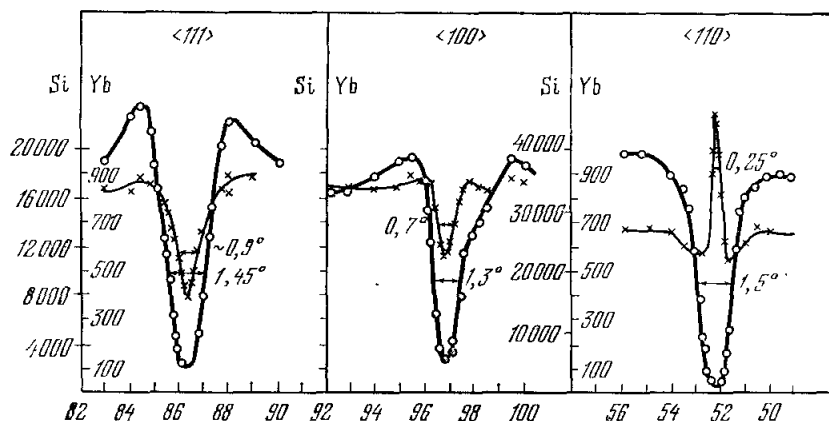


Рис. 25. Результат эксперимента Эйзена и Уггерхой<sup>68</sup> по определению местоположения Yb в Si.

случаев занимать два различных междоузельных положения. Отличие своих результатов от работы<sup>36</sup> Эйзен и Уггерхой объясняют, в частности,

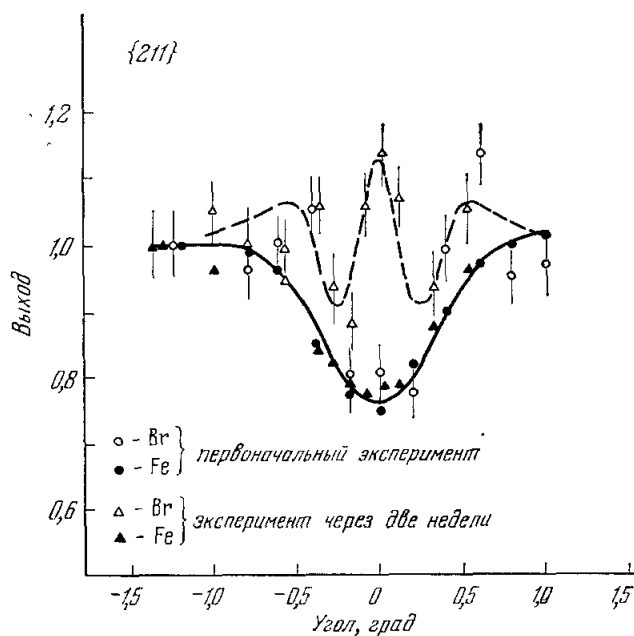


Рис. 26. Тройной пик в Fe, легированном бромом (эксперимент Александра, Калагана и Пюта<sup>59,62,118</sup>).

тем, что условия легирования атомов Yb в кремний несколько отличались в обоих экспериментах, а это, как ясно из п. а) гл. 5, может действительно привести к различным результатам.

В эксперименте Александра, Калагэна и Поута (см. <sup>59,62</sup>) определялось местоположение атомов брома в железе. Это один из наиболее тонких и сложных экспериментов, проведенных до настоящего времени. Вдоль плоскости  $\langle 211 \rangle$  авторы обнаружили впервые тройной пик (рис. 26).

Детальный анализ эксперимента показал, что 40% атомов находятся в замещающем состоянии, а остальные 60% занимают междоузельное положение. При этом оказалось, что эти положения не соответствуют

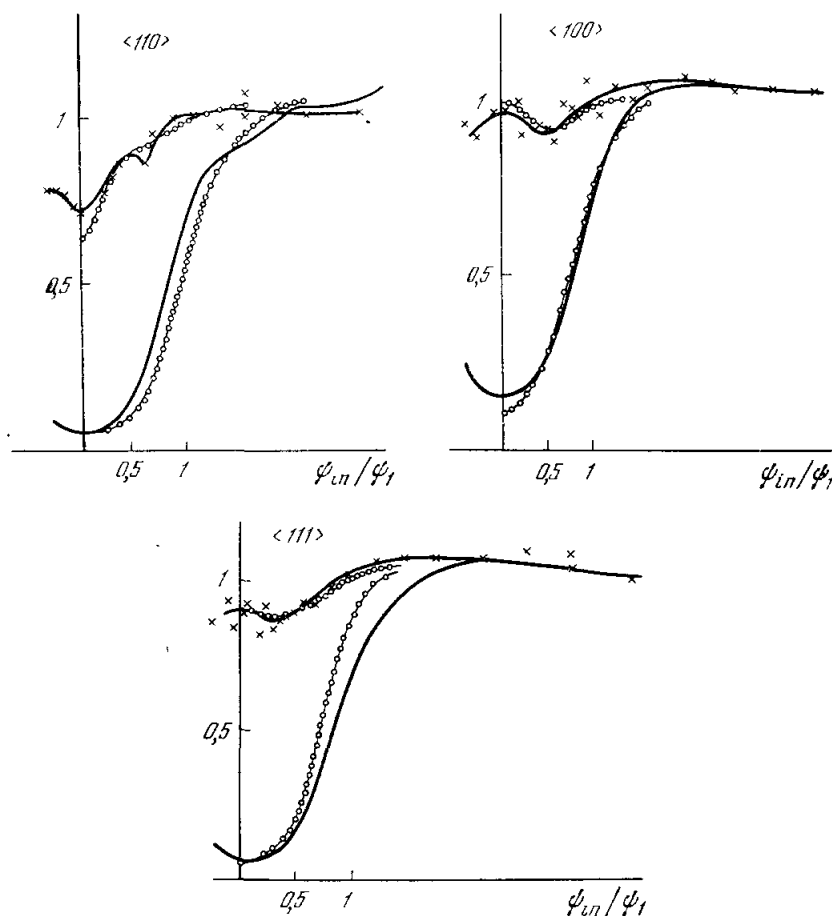


Рис. 27. Результат эксперимента по определению В в Si.

Крестики обозначают экспериментальный выход, кружки — расчет (сплошные кривые — выход на атомах матрицы, кружки — расчет).

обычным тетраэдральным междоузлиям. Авторы приходят к выводу, что для правильной интерпретации эксперимента необходимо проводить анализ углового распределения вдоль некоторых главных кристаллографических осей и плоскостей. Этот эксперимент продемонстрировал, что появление тонкой структуры, т. е. многократных пиков, в угловом распределении существенно облегчает интерпретацию экспериментов. Несмотря на то, что примесные атомы брома залегали недалеко от поверхности ( $\sim 400 \text{ \AA}$ ), машинные расчеты и аналитический подход, основанный на предположении об установлении равновесного распределения, дали приблизительно одинаковые результаты.

В работе Матяша, Скакуна и Дикого<sup>119</sup> эффект перераспределения потока недавно использовался для определения местоположения примесного атома кислорода в ниобии. Эти авторы получили экспериментально многократные пики в аксиальных и плоскостных каналах. Это позволило им показать, что примесные атомы кислорода занимают октаэдрические междоузлия внутри ячейки решетки.

в) **Определение местоположения бора в кремнии.** Теория эффекта перераспределения потока недавно была использована в работе<sup>120</sup>, чтобы определить положение внедренного атома бора в решетке кремния.

Легирование проводилось ионами бора с энергией 50 кэв (доза  $6 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ ). Использовалась ядерная реакция  $B(p, \alpha)Be$ . Энергия протонов  $E = 700 \text{ кэв}$ .

На рис. 27 показаны результаты измерений вдоль главных осевых каналов. Эти данные были получены после отжига при температуре 500 °С.

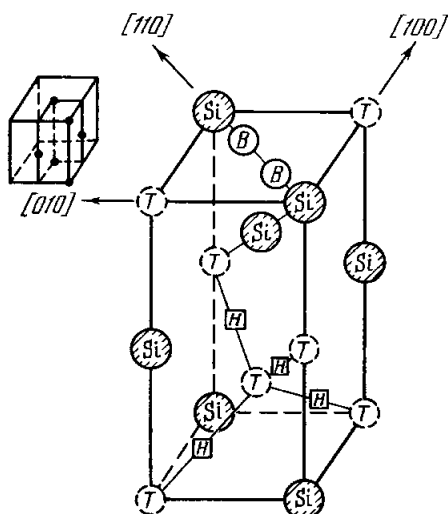


Рис. 28. Элементарная ячейка кремния. Т и Н — тетраэдральные и гексагональные междоузлия, В — полученное местоположение атома бора<sup>120</sup>.

Экспериментальные данные свидетельствуют о наличии центральных пиков при сканировании поперек осей  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$  и двойных пиков — при сканировании поперек оси  $\langle 110 \rangle$ .

Результаты сравнивались с расчетом нормированного выхода в зависимости от угла падения пучка. Выход был найден путем вычисления относительного потока протонов в соответствующих каналах.

С помощью решения кинетического уравнения типа Фоккера — Планка учитывалось изменение поперечной энергии, вызванное рассеянием на электронах, тепловых колебаниях и дефектах.

Расчеты и их сравнения с экспериментом показывают, что около 20% атомов бора находятся в замещающем состоянии, остальные 80% — в междоузлиях.

Наилучшее согласие теории с экспериментом (рис. 27) достигается в случае, если предположить, что атомы бора лежат вдоль оси  $\langle 110 \rangle$  на расстоянии 0,97 Å от замещающего положения.

Найденное положение показано на рис. 28. Как видно, оно не совпадает с тетраэдральным или гексагональным междоузлем. При отжиге, когда  $t \geq 500$  °С, наблюдается четырехкратный пик вдоль  $\langle 110 \rangle$ . Это можно объяснить тем, что в этом случае бор занимает позиции вдоль диагонали  $\langle 111 \rangle$ , посередине между ближайшими атомами.

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

К настоящему времени уже выполнено немало работ, в которых техника каналирования и эффект перераспределения потока были использованы для определения местоположения внедренных атомов.

Здесь не затронуты работы, в которых ориентационные эффекты были использованы для определения профиля внедренных ионов и радиа-

ционных дефектов, определения числа остаточных дефектов, изучения динамики отжига дефектов и т. д.

В отличие от оптических и электрических измерений, данный метод дает прямую, а не косвенную информацию о точном положении внедренной примеси.

В сильно дефектных кристаллах техника каналирования с использованием теории эффекта перераспределения потока обладает рядом существенных преимуществ перед техникой ЭПР, эффекта Мэссабауэра и т. д.

Использование характеристического рентгеновского излучения для идентификации положения атомов в решетке даст в дальнейшем, по-видимому, возможность получать нужную информацию и в тех случаях, когда концентрация внедренной примеси на много порядков будет меньше концентрации атомов матрицы.

В заключение мне хочется выразить глубокую благодарность О. Б. Фирсову за постоянный интерес к моим работам и многочисленные полезные обсуждения. Я благодарен Б. Б. Кадомцеву, Ю. В. Мартыненко, А. А. Рухадзе и Б. М. Смирнову за интерес к этой работе и полезные замечания.

Научно-исследовательский институт ядерной физики (НИИЯФ)  
МГУ им. М. В. Ломоносова

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. М. М. Бредов, Р. Ф. Комарова, А. Р. Регель, ДАН СССР 99, 69 (1954); 113, 795 (1957).
2. J. A. Davies, J. Friesen, J. D. McIntyre, Canad. J. Chem. 38, 1526 (1960).
3. G. K. Wehner, J. Appl. Phys. 26, 1056 (1955).
4. R. H. Silsbee, *ibid.* 28, 1246 (1957).
5. P. K. Rol, J. M. Fluid, E. P. Vienböck, M. de Jong, in: Proc. of 4th Intern. Conference on Ionization Phenomena in Gases, Amsterdam, p. 257, 1960.
6. В. А. Молчанов, В. Г. Тельковский, ДАН СССР 136, 801 (1961).
7. Е. С. Машкова, В. А. Молчанов, Д. Д. Одинцов, *ibid.* 151, 1074 (1963); ФТТ 5, 3426 (1963).
8. Д. Д. Одинцов, *ibid.*, стр. 1114.
9. Ю. В. Мартыненко, ФТТ 6, 2003 (1964).
10. M. T. Robinson, O. S. Oen, Phys. Rev. 132, 2385 (1963).
11. R. S. Nelson, M. W. Thompson, Phil. Mag. 8, 1677 (1963).
12. G. R. Piercy, F. Brown, J. A. Davies, M. McCargo, Phys. Rev. Lett. 10, 399 (1963).
13. G. Deaenaley, IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-11, 249 (1964).
14. B. Domeij, K. Björkvist, Phys. Lett. 14, 127 (1965).
15. A. F. Tulinov, V. S. Kulikauskas, M. M. Malov, *ibid.* 18, 304 (1965); ДАН СССР 162, 546 (1965).
16. D. S. Hemmel, R. E. Holland, Phys. Rev. Lett. 14, 945 (1965).
17. В. М. Агранович, С. А. Куркин, Д. Д. Одинцов, Препринт ФЭИ № 53, 1966.
18. J. Lindhard, Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 34, No. 14 (1965) (см. перевод УФН 99, 249 (1969)).
19. J. Lindhard, Phys. Lett. 12, 126 (1964).
20. Ю. Каран, Ю. В. Кононец, ЖЭТФ 58, 226 (1970); 64, 1042 (1973). 66, 1693 (1974).
21. P. Lervig, J. Lindhard, V. Nielsen, Nucl. Phys. A96, 481 (1967).
22. Н. П. Калашников, М. И. Рязанов, Ф. И. Чуховский, ЖЭТФ 54, 822 (1968); 63, 1107 (1972).
23. C. S. Newton, L. T. Chadderton, Rad. Eff. 10, 33 (1971).
24. Atomic Collisions and Penetration Studies. Proc. of the Intern. Conference, Canad. J. Phys. 46, 6 (1968).
25. Atomic Collisions Phenomena in Solids, Ed. D. W. Palmer, M. W. Thompson and P. D. Townsend, Amsterdam, North-Holland, 1970.
26. Дж. Мейер, Л. Эрикссон, Дж. Дэвис, Ионное легирование полупроводников, М., «Мир», 1973.

27. J. H. Bariet, *Phys. Rev. Lett.* 31, 1542 (1973).
28. В. В. Белошицкий, М. А. Кумахов, *ФТТ* 15, 1588 (1973).
29. D. D. Armstrong, W. M. Gibson et al., *Rad. Eff.* 12, 143 (1972); А. А. Бедняков, Ю. Н. Жукова, Г. А. Иферов, В. С. Куликаускас, А. Ф. Тулинов, В. Л. Чернов, сборник «Труды V Всесоюзного совещания по физике взаимодействия заряженных частиц с монокристаллами», М., Изд-во МГУ, 1974, стр. 178.
30. E. Bogh, *Rad. Eff.* 12, 13 (1972).
31. G. Della Mea, A. V. Drigo, S. L. Russo, P. Mazzoldi, *Phys. Rev.* B7, 4029 (1973).
32. M. J. Pedersen, J. U. Andersen, D. J. Elliot, E. Lægsgaard, in: *Abstracts of Intern. Conference on Atomic Collisions in Solids*, Gatlinburg, 1973, p. 32.
33. М. А. Кумахов, Препринт МГУ Л-122178, Москва, 1970, ч. II.
34. М. А. Kumakhov, *Phys. Lett.* A32, 538 (1970).
35. М. А. Кумахов, *ДАН СССР* 196, 1300 (1971); 203, 794 (1972).
36. J. U. Andersen et. al., *Rad. Eff.* 7, 25 (1971).
37. М. А. Kumakhov, *ibid.* 15, 85 (1972).
38. М. А. Kumakhov, *Phys. Lett.* A39, 191 (1972).
39. Н. Е. Shiott, E. Bonderup, J. U. Andersen, H. Esbensen, *цит. в* <sup>32</sup> сборник, p. 34.
40. М. А. Kumakhov, *ibid.*, p. 30.
41. V. V. Beloshitsky, Yu. V. Bulgakov, M. A. Kumakhov, *Phys. Lett.* A40, 181 (1972).
42. G. Foti, F. Grasso, R. Quattrochi, E. Rimini, *Phys. Rev.* B3, 2169 (1971).
43. K. Morita, N. Itoch, *J. Phys. Soc. Japan* 30, 1439 (1971).
44. K. Björkvist, B. Carlting, B. Domeij, *Rad. Eff.* 12, 267 (1972).
45. R. Behrish, B. Scheiser, F. Schulz, *ibid.* 13, 33.
46. S. U. Campisano et al., *Phys. Lett.* A35, 119 (1971); G. Foti et al., *Lett. Nuovo Cimento* 4, 707 (1970).
47. В. В. Белошицкий, М. А. Кумахов, *ЖЭТФ* 62, 1144 (1972).
48. V. V. Beloshitsky, M. A. Kumakhov, V. A. Muralev, *Rad. Eff.* 13, 9 (1972); 20, 95 (1973).
49. E. Bonderup, H. Esbensen, J. U. Andersen, H. Schiott, *ibid.* 12, 261 (1972).
50. M. Kitagawa, Y. H. Ohtzuki, *Phys. Rev.* B8, 3117 (1973).
51. В. В. Белошицкий, М. А. Кумахов, *ЖЭТФ* 66, 1788 (1974).
52. S. U. Campisano, G. Foti, F. Grasso, E. Rimini, *цит. в* <sup>32</sup> сборник, p. 26.
53. В. С. Андреев, В. Н. Бораев, Н. К. Голубков, А. А. Пузиков, А. Ф. Тулинов, в кн. «Труды III Всесоюзного совещания по физике взаимодействия заряженных частиц с монокристаллами», М., Изд-во МГУ, 1972, стр. 140.
54. М. А. Кумахов, сборник «Тезисы VI Всесоюзного совещания по физике взаимодействия заряженных частиц с монокристаллами», М., Изд-во МГУ, 1974, стр. 13.
55. R. B. Alexander, G. Dearnaley, D. V. Morgan, J. Poate, *Phys. Lett.* A32, 365 (1970).
56. R. B. Alexander, *D. Ph. Thesis* (Oxford University, 1971).
57. R. B. Alexander, G. Dearnaley, D. V. Morgan, J. M. Poate, D. Van Vliet, in: *Proc. of European Conference on Ion Implantation*, Reading, England, 1971, p. 181.
58. D. Van Vliet, *Rad. Eff.* 10, 137 (1971).
59. R. B. Alexander, P. T. Callaghan, J. M. Poate. *Preprint* (1973); *Phys. Rev.* B9, 3022 (1974).
60. В. А. Рябов, *ЖЭТФ* 63, 1096 (1972).
61. J. H. Barret, *Phys. Rev.* B3, 1527 (1971).
62. R. B. Alexander, P. T. Callaghan, *Phys. Lett.* A45 (5) (1973).
63. а) Г. А. Иферов, Г. П. Похил, А. Ф. Тулинов, *Письма ЖЭТФ* 6, 250 (1967); б) J. U. Andersen, E. Uggerhoj, W. M. Gibson, in: *Proc. of the Conference on Application of Ion Beams to Semiconductor Technology*, Grenoble, France, 1967, p. 153.
64. F. W. Saris, D. Onderlinden, W. F. Van der Weg, *цит. в* <sup>25</sup> сборник, p. 540.
65. B. Domeij, G. Fladda, N. G. E. Johansson, *Rad. Eff.* 6, 155 (1970).
66. N. D. Carstanjen, R. Sizmann, *ibid.* 12, 255 (1972).
67. N. D. Carstanjen, R. Sizmann, *Phys. Lett.* A40, 93 (1972).
68. F. Eisen and E. Uggerhoj, *Rad. Eff.* 12, 233 (1972).
69. В. В. Белошицкий, М. А. Кумахов, *ДАН СССР* 212, 846 (1973).

70. J. A. Davies et al., *Phys. Rev.* **165**, 345 (1968).
71. P. P. Goode, M. A. Wilkins, G. Dearnaley, *Rad. Eff.* **6**, 237 (1970).
72. R. A. Moline, *J. Appl. Phys.* **42**, 3553 (1971).
73. E. Bough, *Rad. Eff.* **7**, 115 (1971).
74. F. Eisen, *Canad. J. Phys.* **46**, 587 (1968).
75. Е. И. Зорин и др., *ФТТ* **6**, 3222 (1964).
76. В. М. Гусев и др., *ФТТ* **8**, 1708 (1966).
77. И. Б. Амирханова, И. Г. Гвердцители, А. И. Кулдамашвили и др., в кн. «Радиационная физика неметаллических кристаллов», т. III, Киев, «Наукова думка», 1971, стр. 111.
78. Р. И. Гарбер, А. К. Гнап, В. С. Крыхтин, А. И. Федоренко, *ibid.* стр. 122.
79. Р. И. Гарбер, И. Г. Гвердцители, А. К. Гнап, А. И. Гулдамашвили, А. А. Модлин, А. И. Федоренко, *ibid.*, стр. 133.
80. М. А. Кумахов, цит. в <sup>33</sup> препринт, ч. III, IV.
81. V. A. Eltekov, D. S. Karpusov, Yu. V. Martinenko, V. E. Yurasova, in: *Proc. of the Intern. Conference on Atomic Collisions Brighton*, 1970, p. 657.
82. Ю. В. Мартыненко, *ФТТ* **13**, 2580 (1971).
83. М. А. Кумахов, В. А. Муралев, *ФТП* **6**, 1564 (1972).
84. A. Desalvo, R. Rosa, F. Zignani, *Lett. Nuovo Cimento* **2**, 390 (1971).
85. Н. А. Ухин, *ФТП* **6**, 931 (1972).
86. E. Bough, *Canad. J. Phys.* **46**, 653 (1968).
87. Н. С. Романов, Л. С. Смирнов, *ФТП* **6**, 1631 (1972).
88. Е. И. Зорин, П. В. Павлов, Д. Н. Тетельбаум, А. Ф. Хохлов, *ФТП* **7**, 2006 (1973).
89. В. М. Гусев, М. И. Гусева, Е. С. Ионова, А. Н. Мансурова, В. К. Старикин, *ibid.*, стр. 2153.
90. F. Eisen, B. Welch, *Rad. Eff.* **7**, 143 (1971).
91. Физические основы ионно-лучевого легирования. Сборник статей под редакцией П. В. Павлова, Горький, Изд-во ГГУ, 1972.
92. В. С. Вавилов, Н. У. Исаев, Б. Н. Мукашев, А. В. Спицын, *ФТП* **6**, 1041 (1972).
93. В. М. Коляда, В. Г. Злобин, И. А. Запорожен, *ibid.*, стр. 1813.
94. Г. А. Гуманский, И. С. Ташлыкков, *ИФЖ* **21**, 1105 (1971).
95. В. С. Вавилов, М. А. Гукасян, Е. А. Конорова, Ю. В. Милютин, *ФТП* **6**, 2384 (1972).
96. F. F. Komarov, M. A. Kumakhov, *Phys. Stat. Sol.* **58**, 389 (1973).
97. B. E. Baklitsky, E. S. Parilis, *Rad. Eff.* **12**, 137 (1972).
98. I. G. Gverdtsuteli, A. I. Guldashvili, E. M. Diasamidze, S. A. Zaslavskii, A. N. Kalinin, M. A. Kumakhov, V. A. Muralev, *ibid.* **19**, 171 (1973).
99. W. M. Gibson, F. W. Martin, R. Stensgaard, F. Palmgren-Hensen, N. I. Meyer, G. Galster, A. Johansen, J. S. Olsen, *Canad. J. Phys.* **46**, 675 (1968).
100. J. A. Davies, J. Denhartog, L. Eriksson, J. W. Mayer, *ibid.* **45**, 4053 (1967).
101. G. Fladda, K. Björkqvist, L. Eriksson, D. Sigurd, *Appl. Phys. Lett.* **16**, 313 (1970).
102. L. Eriksson, J. A. Davies, J. Denhartog, H. Matzke, J. L. Whitton, *Canad. J. Phys.* **5**, 40 (1966).
103. J. C. North, W. M. Gibson, *Appl. Phys. Lett.* **16**, 126 (1970).
104. J. W. Mayer, L. Eriksson, S. T. Picraux, J. A. Davies, *Canad. J. Phys.* **46**, 663 (1968).
105. J. W. Mayer, J. A. Davies, L. Eriksson, *Appl. Phys. Lett.* **11**, 365 (1967).
106. L. Eriksson, J. A. Davies, N. G. E. Johansson, J. W. Mayer, *J. Appl. Phys.* **40**, 842 (1969).
107. L. Eriksson, G. Fladda, K. Björkqvist, *Appl. Phys. Lett.* **14**, 195 (1969).
108. L. Eriksson, J. A. Davies, J. W. Mayer, in: *Radiation Effects in Semiconductors*, Ed. F. Vook, N. Y., Plenum Press, 1968, p. 398.
109. S. T. Picraux, N. G. E. Johansson, J. W. Mayer, in: *Semiconducting Silicon*, Ed. R. Haberecht and E. Kern, N. Y., Electrochem. Soc., 1969, p. 422.
110. J. A. Davies, L. Eriksson, J. W. Mayer, *Appl. Phys. Lett.* **12**, 255 (1968).
111. L. Eriksson, J. A. Davies, J. Denhartog, J. W. Mayer, O. L. Marsh, P. Mankarious, *ibid.* **10**, 323 (1967).
112. J. A. Cairns and R. S. Nelson, *Phys. Lett A27*, 14 (1968).

113. E. B o g h, in: Interaction of Radiation with Solids, Ed. A. Bishay, N.Y., Plenum Press, 1967, p. 361.
  114. E. U g g e r h o j, J. U. A n d e r s e n, Canad. J. Phys. **46**, 543 (1967).
  115. G. F l a d d a, P. M a z z o l d i, E. R i m i n i, D. S i g u r d, L. E r r i k s s o n, Rad. Eff. **1**, 249 (1969).
  116. J. W. M a y e r, J. A. D a v i e s, L. E r i k s s o n, Appl. Phys. Lett. **11**, 365 (1967).
  117. В. А. Соменков, А. В. Гурская, М. Г. Земляков, М. Е. Кост, Н. А. Черноплёков, А. А. Чертков, ФТТ **10**, 1076 (1968).
  118. R. B. A l e x a n d e r, P. T. C a l l a g h a n, J. M. P o a t e, in: Abstracts of the Intern. Conference on Ion Implatation, New York, 1972, p. 57.
  119. П. П. Матяш, Н. А. Скакун, Н. П. Диккий, Письма ЖЭТФ **19**, 31 (1974).
  120. В. В. Белошицкий, Н. П. Диккий, М. А. Кумахов, П. П. Матяш, Н. А. Скакун, цит. в <sup>54</sup> сборник, стр. 43.
  121. L. T. C h a d d e r t o n, Phil. Mag. **18**, 1017 (1968); J. Appl. Cryst. **3**, 429 (1970).
  122. А. Г. Кадменский, Г. А. Иферов, А. Ф. Тулинов, цит. в <sup>29</sup> сборник, стр. 45.
  123. O. B. F i r s o v, Rad. Eff. **21**, 265 (1974).
-