### САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ПЕТРА ВЕЛИКОГО

А.И.Титов, П.А.Карасев

# Ориентационные эффекты при взаимодействии быстрых ионов с кристаллами

Учебное пособие

Санкт-Петербург 2024

#### Рецензенты:

Доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики СПбПУ *В.В.Козловский* 

Доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник – заведующий лабораторией ФГБУН ФТИ им.А.Ф.Иоффе

А.Н.Зиновьев

Титов Андрей Иванович, Карасев Платон Александрович, Ориентационные эффекты при взаимодействии быстрых ионов с кристаллами. Учебное пособие. – СПб., 2024. – 35 с.

В пособии дано изложение современного состояния исследований области коррелированных взаимодействий, происходящих при облучении кристаллических материалов пучками быстрых ионов. Рассмотрены базовые физические принципы, объясняющие особенности коррелированных взаимодействий налетающих частиц с цепочками и плоскостями атомов в кристалле. Выполнен анализ закономерностей взаимодействия ионов, показаны теоретические походы к рассмотрению вопроса. Приведены основные экспериментальные факты, проведено обобщение результатов по направлениям, которых проявляются указанные явления. Описано влияние имплантируемых каналирования ионов на распределения примесей, экспериментального изучения потенциалов взаимодействия при помощи анализа картин когерентно рассеянных ионов, проходящих сквозь тонкие монокристаллы, радужное рассеяние пучка ионов при скользящем падении на поверхность.

Пособие соответствует ФГОС магистерской подготовки по направлениям 03.04.02 «Физика», 11.04.04 «Электроника и наноэлектроника» и 16.04.01. «Техническая физика». Пособие предназначено для студентов ВУЗов, обучающихся по данным направлениям подготовки магистров. Пособие может быть использовано будущими магистрами и преподавателями СПбПУ Петра Великого, НИЯУ МИФИ, МГТУ им. М.В.Баумана, ННГУ им. Лобачевского и других ВУЗов при подготовке к лекциям и практическим занятиям.

Табл. 0. Ил. 23. Библиогр.: 19 назв.

© А.И.Титов, П.А.Карасев, 2024

## Содержание

Пре	едисловие	4	
1.	Введение	5	
2.	Природа коррелированных взаимодействий	6	
2.1	Взаимодействие ионов с цепочкой атомов	6	
2.2	Функции экранирования и потенциалы взаимодействия	8	
2.3	Потенциал взаимодействия для коррелированных столкновений	11	
2.4	Плоскостное каналирование	13	
3.	Взаимодействие ионов с монокристаллами	14	
3.1	Каналирование в монокристаллах	14	
3.2	Распределение внедренной примеси при каналировании	16	
3.3	Выход процессов, связанных с близкими взаимодействиями ионов с атомами	19	
4.	Применение ориентационных эффектов	22	
4.1	Резерфордовское обратное рассеяние	22	
4.2	Эффект блокировки (эффект теней)	25	
4.3	Каналирование при прохождении сквозь тонкие мишени. Радужное рассеяние.	27	
4.4	Радужное рассеяние при отражении от поверхности	33	
Биб	Библиографический список35		

#### Предисловие

Изучение воздействия радиации на свойства твердых тел имеет более чем 80-ти летнюю историю. Первоначально основной интерес к радиационным явлениям был продиктован необходимостью понять и уменьшить их проявления в конструкционных материалах ядерных реакторов ещё в конце 1940-х [1]. И в этом контексте их рассматривали как радиационные повреждения. Идея о возможности контролируемого введения примесей с целью преднамеренного изменения электрических свойств приповерхностных слоёв материалов привела к созданию метода ионной имплантации [2]. Первые сообщения о возможности использования пучков ускоренных заряженных частиц для легирования полупроводниковых материалов появились в конце 50-х годов XX века. В течение прошедшего с тех пор времени было проведено (в значительной мере с участием российских ученых) систематическое исследование процессов торможения заряженных частиц, формирования радиационных дефектов и распределений внедряемых таким образом примесей и других сопутствующих эффектов. Наряду с практической важностью исследования радиационного легирования полупроводниковых материалов, такой цикл работ оказался актуальным и в научном плане, поскольку он предоставил необходимые для развития радиационной физики твердого тела сведения о процессах генерации радиационных дефектов, свойствах этих дефектов и их взаимодействии с примесями в полупроводниках. Основные принципы описания процессов торможения ускоренных ионов были заложены Бором [3], и затем развиты Линдхардом, Шарфом и Шиоттом (ЛШШ) [4, 5]. Подробное рассмотрение этих вопросов приведено в ряде монографий и учебников (например, [2, 6]) и не является предметом настоящего пособия.

В то же время, был обнаружен ряд особенностей, возникающих при торможении ионов в поликристаллических мишенях и кристаллических мишенях при облучении в низко-индексных направлениях, так называемые ориентационные эффекты. Интерес к ним сегодня связан с одной стороны с возможностью использования этих эффектов для исследования свойств кристаллов и кристаллических поверхностей, а с другой — с открытием ряда новых явлений, имеющих фундаментальный характер, таких как каналирование [2], а также излучение рентгеновских лучей при каналировании [7], поворот частиц высокой энергии изогнутыми кристаллами [8], радужное рассеяние при падении пучков на монокристаллическую поверхность под скользящими углами [9] и ряд других. Изучение упомянутых явлений позволяет получать информацию не только о структурных особенностях поверхностных слоев кристаллов, но и о характере потенциалов взаимодействий что делает ориентационные эффекты привлекательным объектом исследований.

#### 1. Введение

Атомы в кристаллах расположены упорядоченно и подчиняются трансляционной симметрии. В результате они формируют атомные ряды и плоскости, которые соответствуют низко-индексным направлениям и плоскостям кристаллической решётки. Достаточно взглянуть на модель кристалла, чтобы увидеть, что в некоторых направлениях кристалл «прозрачен» (см. рис. 1), а при отклонении от них — нет. Будем называть такие «непрозрачные» направления *случайными*. Непредвзятый наблюдатель мог бы предположить, что в «прозрачном» направлении падающие на поверхность быстрые ионы должны проникать в кристалл глубже, чем при падении в случайном. Это как раз и есть одно из внешних проявлений *каналирования ионов*. Однако открытие каналирования ионов в монокристаллах произошло только в начале 60-х годов XX столетия. Мало того, это открытие было сделано вычислительной машиной! Рассмотрим кратко поучительную историю открытия этого фундаментального явления.

Первое предположение о возможности каналирования частиц было высказано У.Г. Брэггом ещё в 1910 г. для объяснения появления дифракционных картин, полученных М. Лауэ, при взаимодействии с кристаллами рентгеновских лучей. Брэгг предположил, что корпускулы - рентгеновские лучи - создают упорядоченную картину пятен на фотоплёнке из-за наличия открытых каналов в кристалле. Чуть позднее (1912 г.) И. Штарк высказал идею, что подобный эффект должен иметь место и для протонов. Однако вскоре стало ясно, что система пятен Лауэ возникает в результате дифракции рентгеновских лучей как электромагнитных волн, и об этих предположениях забыли на ~ 50 лет.

В 1962 году канадский физик Дж. Дэвис, измеряя распределение по глубине ионов, внедрённых в поликристаллические мишени, обнаружил, что, хотя эти распределения в целом хорошо соответствуют уже созданной в это же датчанином И. Линдхардом время сотрудниками теории проникновения ионов в неупорядоченное вещество, однако 10-20% всех ионов «убегают» слишком глубоко. Сразу же М. Робинсон и О. Оен из США заподозрили что, возможно. некоторые кристалликов, составляющих поликристалл, были расположены так, что ионы попадали в открытые каналы кристаллической решетки, и это каким-то

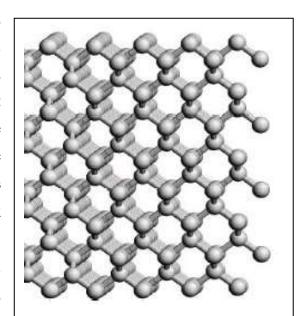


Рис. 1. Вид на кристалл со структурой типа алмаза. Плоскость рисунка совпадает с кристаллографической плоскостью {110}.

образом влияло на их движение. Они промоделировали движение ионов в кристалле на электронной вычислительной машине (ЭВМ) и, наконец-то, открытие каналирования свершилось! ЭВМ показала, что ионы, с исходным направлением движения параллельным атомным цепочкам, составляющим открытый канал, которые попадают при пересечении поверхности кристалла не очень далеко от центров этих каналов, фокусируются атомными рядами и, двигаясь внутри этих каналов, проникают в твёрдое тело аномально глубоко.

После этого открытия экспериментальная проверка его не потребовала большого времени. Вышеописанные эксперименты Дж. Дэвиса и результаты машинного моделирования были опубликованы в 1963 г. и в том же году в печати появились статьи трёх экспериментальных групп, полностью подтвердившие результаты компьютерных расчётов. В 1965 году И. Линдхард опубликовал теорию каналирования ионов в монокристаллах [10], которая в своей основе используется до настоящего времени. Далее число публикаций по каналированию стало лавинообразно нарастать и сейчас полное число работ, связанных с данным явлением, далеко перевалило за 10 тысяч.

Действительно, прав был Альберт Сент-Дьёрдьи, лауреат Нобелевской премии по медицине и биологии 1937 г.: «Чтобы сделать открытие надо видеть то, что видел каждый, и думать так, как никто не думал».\*

Можно сказать, что слишком много внимания уделено истории открытия каналирования, но проблема того, какими извилистыми путями интернациональное сообщество учёных приходит к пониманию окружающей нас реальности, никогда не теряет своей актуальности.

#### 2. Природа коррелированных взаимодействий

#### 2.1 Взаимодействие ионов с цепочкой атомов

Рассмотрим физическую природу каналирования, базируясь на классической теоретической работе Й. Линдхарда. Представим, что у нас есть цепочка атомов, разделённых промежутками d (см. рис. 2). Пусть на эту цепочку в плоскости нашего рисунка падает под небольшим углом  $\psi$  ускоренный ион с энергией  $E_I$  и скоростью  $v_I$ . Для большей наглядности, исходное положение этого иона выберем так, чтобы при отсутствии его взаимодействия с атомами цепочки он попадал прямо «в лоб» атома А. На самом деле, при приближении иона к ряду на него будут действовать силы отталкивания, создаваемые

6

<sup>\*</sup> В оригинале это звучит так: "Discovery consists of seeing what everybody has seen and thinking what nobody has thought."

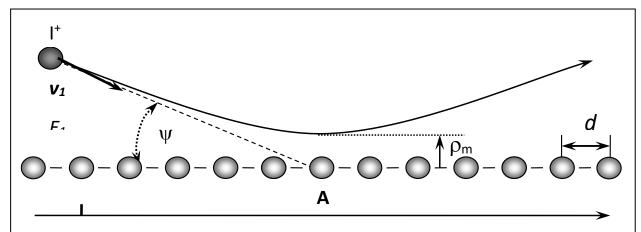


Рис. 2. Схематическое изображение взаимодействия иона с цепочкой равноудалённых одинаковых атомов

атомами, стоящими слева от атома A (см. рис 2). Из-за упорядоченного расположения атомов в цепочке отталкивание коррелировано, то есть силы, действующие на пролетающий ион направлены в одну сторону. В результате никакого лобового удара не происходит и он просто отражается от цепочки. Минимальное расстояние, на которое ион приблизится к цепочке  $\rho_{\rm m}(E_I, d, \psi)$  будет существенно превышать расстояние, на которое сблизились бы ион и атом A при лобовом столкновении. Это-то и есть основной эффект при каналировании и других коррелированных взаимодействиях: *близкие ионно-атомные столкновения для коррелированных столкновений невозможны*!

Очевидно, что такой эффект цепочки имеет место до тех пор, пока ион, стремящийся провзаимодействовать с данным атомом, «чувствует» по крайней мере еще одного ближайшего соседа, который находится на расстоянии d от атома А. Перпендикулярная цепочкам и параллельная им составляющие скорости иона, падающего на атомный ряд под углом  $\psi$ , с учётом малости угла, равны:

$$v_{\perp} = v_I \sin \psi \approx v_I \psi$$

$$v_{\parallel} = v_I \cos \psi \approx v_I. \tag{1}$$

Если предположить, что основное взаимодействие между ионом и цепочкой происходит в промежутке расстояний  $2\rho_m$  и  $\rho_m$  от её оси, то время этого взаимодействия

$$\tau \approx \rho_{\rm m} / v_{\perp} \approx \rho_{\rm m} / v_{I} \, \Psi \tag{2}$$

и за это время ион должен пройти расстояние вдоль неё не меньшее, чем d. Отсюда получается условие коррелированности столкновений:

$$\rho_{\rm m} / \psi \ge d \tag{3}$$

Потенциал взаимодействия иона с цепочкой  $U_t(\rho, x)$ , по принципу суперпозиции, складывается из потенциалов взаимодействия с каждым её атомом V(r), где r – расстояние между ионом и атомом:

$$U_t(\rho, x) = \sum_{n = -\infty}^{n = +\infty} V\{[(x - nd)^2 + \rho^2]^{1/2}\}$$
(4)

где n — номер атома (целое число), x = 0 соответствует центру атома, номер которого n = 0.

Для коррелированных столкновений естественно заменить  $U_t(\rho, x)$  на усреднённый потенциал цепочки  $U(\rho)$ , зависящий только от  $\rho$  - расстояния между ионом и цепочкой. Действительно, двигаясь вдоль неё под скользящим углом, ион практически выполняет подобное усреднение:

$$U(\rho) = d^{-1} \int_0^d U(\rho, x) dx = d^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} V[x^2 + \rho^2]^{1/2} dx$$
 (5)

Для дальнейшего анализа необходимо знать потенциальную энергию их взаимодействия, то есть выбрать вид потенциала, который позволит описать взаимодействие между частицами.

#### 2.2 Функции экранирования и потенциалы взаимодействия

Если бы электроны не экранировали положительные заряды ядер сталкивающихся частиц, то мы могли бы использовать кулоновский потенциал:

$$V(r) = \frac{e^2 Z_1 Z_2}{r} \tag{6}$$

Здесь e — заряд электрона,  $Z_1$  и  $Z_2$  — атомные потери иона и атома, соответственно, и г — расстояние между ядрами взаимодействующих частиц. Однако пренебрегать электронным экранированием ядер можно только тогда, когда частицы сближаются на расстояние меньше, чем радиусы самых близких к ядру К-оболочек. Последнее имеет место только для очень быстрых частиц при их столкновении, близком к лобовому. В противоположном случае потенциал взаимодействия должен учитывать эту экранировку. Обычно для этого кулоновский потенциал (6) умножается на  $\Phi(r/a)$  —  $\phi$ ункцию экранирования, которая соответствующим образом уменьшает энергию взаимодействия.

$$V(r) = \frac{e^2 Z_1 Z_2}{r} \Phi(r/a) \tag{7}$$

Величина a называется napamempom или nocmoянной экранирования. Она задает «масштаб» функции экранирования: если r << a, то экранирование может не учитываться. Очевидно, что при r << a,  $\Phi(r/a) = 1$ , а при r >> a  $\Phi(r/a) = 0$ .

Й.Линдхард, М.Шарф и Х.Е.Шиотт (в дальнейшем ЛШШ) использовали для определения параметра экранирования выражение, полученное на основании статистической модели атома Томаса-Ферми:

$$a_L = (9\pi/128)^{1/3} a_0 \left( Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{-1/2} \tag{8}$$

Здесь  $a_0$  - радиус первой орбиты для модели атома водорода по Бору ( $a_0 = 0.0529$  нм). ( $9\pi/128$ ) = 0.8853. О.Б.Фирсов предложил для лучшего описания потенциала взаимодействия использовать другой вид функции экранирования:

$$a_F = 0.8853a_0 \left( Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2} \right)^{-2/3} \tag{10}$$

В настоящее время широко применяется еще одна формула для представления параметра а:

$$a_U = 0.8853a_0 \left(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}\right)^{-1} \tag{11}$$

Таким образом, видно, что в выборе параметра экранирования имеет место не столько точный математический расчет, сколько его приближенная оценка. Однако заметим, что различия в получаемых по разным формулам значениях, a лежит в пределах 20%, а абсолютные значения лежат в диапазоне  $\sim 0.007-0.03$  нм. Подробнее это видно на рис. 3, где в предположении, что заряды иона и атомов в цепочке равны  $Z_1 = Z_2 = Z$ , представлены зависимости приведенных выше вариантов параметра экранирования от Z.

Точное нахождение функции экранирования потребовало бы квантоворассмотрения механического задачи взаимодействия для каждой конкретной пары Ha ион-атом. практике, однако,  $\Phi(r/a)$ выбирают, руководствуясь общетеоретическими представлениями и тем, насколько получаемый в расчётах, основанных на выбранном виде функции экранирования, результат соответствует экспериментальным данным, и/или точным квантовомеханическим расчётам. Кроме того, некоторых случаях важную роль в выборе

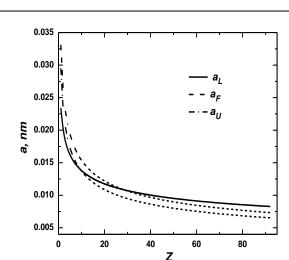


Рис. 3. Параметры экранирования как функция Z, для трёх разных представлений (в предположении, что заряды иона и атомов в цепочке равны).

функции экранирования играет и возможность получения аналитических решений для рассчитываемых параметров. Все это привело к тому, что к настоящему времени имеется очень большое число вариантов математического описания функции экранирования. Нильс Бор использовал очень простую функцию экранирования (см. рис.4, кривая 1):

$$\Phi(r/a) = \exp(-r/a) \tag{12}$$

Подобная функция  $\Phi(r/a)$  очень сильно переоценивает экранирование заряда ядра электронами и дает значения V(r) существенно более низкие, чем реальность, для случаев, когда взаимодействующие частицы сближаются на расстояния r>a. В расчетах, выполненных авторами модели ЛШШ, в качестве функции экранирования  $\Phi(r/a)$  использовалась функция Томаса-Ферми  $\phi_{T-F}(r/a)$ , полученная из статистической модели атома, то есть

$$\Phi(r/a) = \varphi_{T-F}(r/a) \tag{13}$$

 $\varphi_{T-F}(r/a)$  не является аналитической функцией и задается в виде таблиц или аппроксимируется аналитическими выражениями. Ее вид представлен на рис. 4, кривая 2. Заметим, что плотность электронов убывает по мере роста расстояния от ядра. Естественно, что при уменьшении плотности электронов статистические представления «работают» все хуже и хуже, то есть модель Томаса-Ферми должна давать на таких расстояниях результаты, отличающиеся от реальности. Действительно, при  $r \ge a$  (13) недооценивает экранировку, то есть завышает V(r).

Функция экранирования (13) не позволяет рассчитывать в аналитическом виде углы рассеяния и другие параметры, характеризующие взаимодействие ионов с твердым телом, о которых пойдет речь далее. Этого недостатка лишены степенные функции экранирования вида

$$\Phi(r/a) = (k_n/n) \times (a/r)^{n-1} \tag{14}$$

где n — целые числа (n = 1 - 3),  $k_n$  — константа, подбираемая таким образом, чтобы  $\Phi(r/a)$ , определяемая (14), давала значения, близкие к значениям, которые получаются для более реалистичных потенциалов. Еще более адекватные реальности функции экранирования задаются в виде сумм экспонент:

$$\Phi(r/a) = \sum_{i=1}^{k} C_i \exp(-b_i r/a)$$
(15)

Очевидно, что для того, чтобы  $\Phi(r/a)$  оказывалась равной 1 при r << a, необходимо выполнение условия  $\sum_{i=1}^k C_i = 1$ . Примеры функций экранирования для широко используемых в настоящее время потенциалов Мольер и Ленца-Йенсена приведены на рис. 4 (кривые 3 и 4). Эти потенциалы являются лучшим, чем (13), приближением, показывающим силы, действующие в атомных столкновениях при сильных сближениях. В

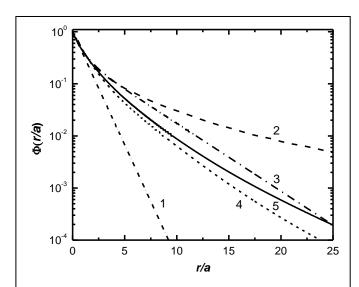


Рис. 4. Функции экранирования для разных приближений. 1- Бор, 2- Томас-Ферми, 3- Мольер, 4- Ленц-Йенсен, 5- ZBL.

них в качестве параметра экранирования обычно используется (10),величина предложенная О.Б. Фирсовым. Также для рассмотрения близких столкновений широко применяется ZBL – потенциал, названный так по первым буквам его авторов (Ziegler, Biersack, Littmark). Этот потенциал был получен как усреднение результатов квантово-механических расчетов очень большого числа комбинаций ион-атом. Длина берется экранирования при ЭТОМ соответствии с (11). В частности, именно

этот потенциал используется для статистического моделирования процессов, связанных с торможением ионов в неупорядоченном веществе, в широко известной программе TRIM.

#### 2.3 Потенциал взаимодействия для коррелированных столкновений

Вернемся к рассмотрению вида потенциала, который позволит описать взаимодействие между ионом и цепочкой атомов. Если в качестве V(r) выбрать потенциал, экранирование для которого основано на модели атома Томаса-Ферми, то

$$U(\rho) = Z_1 Z_2 e^2 \xi(\rho/a)/d \tag{16}$$

$$\xi(\rho/a) = \ln[(Ca/\rho)^2 + 1].$$
 (17)

Здесь  $Z_1$ ,  $Z_2$  – атомные номера иона и атома; e – заряд электрона;  $C \approx \sqrt{3}$ ,  $a = f(Z_1, Z_2)$  – параметр экранирования (см. раздел 2.2). Напомним, что по порядку величины  $a \sim 10^{-11}$ м.

Для расстояний  $\rho < C a$  единицей в аргументе логарифма (17) можно пренебречь и тогда справедливо  $\xi(\rho/a) = 2 \ln(Ca/\rho)$ , и

$$U(\rho) = 2Z_1 Z_2 e^2 d^{-1} \ln(Ca/\rho)$$
(18)

Минимальное расстояние  $\rho_{\rm m}$ , на которое при заданных  $\psi$  и  $E_I$  ион может приблизиться к оси цепочки, определяется ходом  $U(\rho)$ . Действительно, энергия иона с массой  $M_I$ , связанная с его движением перпендикулярно цепочке на большом удалении от неё  $E_{\perp}=M_I$   $v_{\perp}^2/2=E_I\sin^2\psi=E_I|\psi|^2$ , должна полностью переходить в потенциальную энергию на расстоянии наибольшего сближения:

$$U\left(\rho_{m}\right) = E_{\perp} = E_{1}\psi^{2}.\tag{19}$$

Из (16) и (18) и условия корреляции (3) следует:

$$Z_1 Z_2 e^2 d_a^{-1} 2 \ln (Ca / \psi d_a) \ge E_1 \psi^2$$
 (20)

или

$$(Ca/\psi d_a) \exp(-E_1\psi^2 d_a/2 Z_1 Z_2 e^2) \ge 1.$$
 (21)

При увеличении угла падения  $\psi$  от нуля, когда первый сомножитель в левой части неравенства равен бесконечности, а второй, экспоненциальный, — единице, уменьшение левой части (21) происходит в основном из-за более быстрого спада экспоненциального сомножителя по сравнению с гиперболическим предэкспоненциальным. Условие (21) должно тогда выполняться пока последний сомножитель падает не очень сильно, скажем, не более чем в e раз, где e — основание натурального логарифма. Тогда для угла скольжения иона по отношению к оси цепочки должно быть справедливым следующее соотношение:

$$\psi \le \psi_{c1} = \left(\frac{2Z_1 Z_2 e^2}{E_1 d}\right)^{1/2}. \tag{22}$$

Другими словами, условие корреляции столкновений выполняется пока энергия поперечного движения  $E_1$   $\psi$   $^2$  остаётся меньше максимальной высоты эффективного

потенциального барьера 2  $Z_1Z_2$   $e^2/d$ . Заметим, что этот максимальный барьер не зависит ни от первичной энергии иона  $E_1$ , ни от параметра экранирования a.

Таким образом, условие коррелированности столкновений иона с цепочкой атомов и, соответственно, аксиальное каналирование имеют место до тех пор, пока угол скольжения ионов к оси цепочки остаётся меньшим, чем критический угол каналирования  $\psi_c = \psi_{c1}$ 

Формула (22), очевидно, обеспечивает выполнение условия (21) для всех углов, меньших  $\psi_{c1}$ , если  $(Ca/\psi_{c1} d) > 1$ . А это означает, что (22) справедливо, пока  $\psi_{c1} \leq C a/d \approx a/d$  или, в пределе,  $\psi_{c1} \approx a/d$ . Это можно рассматривать как ограничение на значения энергии ионов. Действительно, для  $\psi = \psi_{c1} = a/d_a$  выражение (20) может быть записано как  $Z_1Z_2 \ e^2 \ d^{-1}2 \ln (Ca/(a/d) \ d) \geq E_c \ (a/d)^2$ .

Отсюда  $E_t$  – граничная энергия, выше которой справедливо применение формулы (22), составляет

$$E_t = Z_1 Z_2 e^2 da^{-2} 2 \ln C \approx Z_1 Z_2 e^2 da^{-2}$$
 (23)

Для меньших энергий, когда (22) перестаёт быть справедливым выражением для критического угла каналирования, (17) для  $\xi$  ( $\rho$ /a) может быть приближённо записано, как

$$\xi (\rho/a) \approx (Ca/\rho)^2. \tag{24}$$

Действительно, меньшим энергиям соответствуют большие расстояния, на которые ион может сблизиться с осью цепочки, то есть, в этом случае,  $(Ca/\rho)^2 << 1$ .

Тогда (19) может быть записано с учётом (24) и (3), которое для  $\psi_{c2}$  -критического угла каналирования при таких энергиях - есть  $\rho_{\rm m}$  /  $\psi_{c2} = d$ , следующим образом:

$$(Z_1Z_2 e^2/d) [(Ca)/(\psi_{c2} d)]^2 = E_1\psi_{c2}^2,$$

откуда

$$\psi_{c} = \psi_{c2} = \left[ \left( \frac{Z_{1} Z_{2} e^{2}}{E_{1} d} \right)^{1/2} \frac{Ca}{d} \right]^{1/2} = \left( \frac{Ca}{d\sqrt{2}} \psi_{c1} \right)^{1/2}.$$
 (25)

Эта формула справедлива пока  $(Ca/\rho)^2 << 1$ , поскольку при её выводе использовалось (24). Минимальное значение расстояния максимального сближения при угле, соответствующем критическому, составляет согласно (3)  $\rho_m = \psi_{c2} d$ . Подставив его в данное условие и выразив  $\psi_{c2}$  из (25), получаем

$$\frac{Ca\sqrt{2}}{\psi_{c1}d} << 1. \tag{26}$$

Данное условие выполняется, если  $\psi_{c1} >> a/d$ . Как было показано выше при определении диапазона энергий, при которых справедлива формула для критического угла каналирования  $\psi_{c1}$ , условие  $\psi_{c1} \leq a/d$  приводит к тому, что энергия ионов должна быть

больше  $E_c$ , определяемого (23). Естественно, если условие противоположно, то и энергия в этом случае должна быть меньше  $E_c$ :

$$E_1 < E_c \approx Z_1 Z_2 e^2 da^{-2}$$
 (27)

Таким образом, если энергия иона меньше граничной энергии  $E_c$ , то условие коррелированности столкновений выполняется при  $\psi \leq \psi_{c2}$ . Если же она больше  $E_c$ , то таким условием является  $\psi \leq \psi_{c1}$ .

Как уже говорилось в разделе 2.2, потенциал с функцией экранирования Томаса-Ферми, который был использован при выводе (16), неплохо описывает близкие взаимодействия между ионом и атомом, и менее справедлив для относительно далёких соударений, поэтому можно ожидать, что условия (22), (23) являются более точными, чем (25) и (27).

Итак, если ион подлетает к цепочке атомов под углом, меньшим критического, то он взаимодействует с ней, как с единым целым, и отражается от неё под тем же углом. Исключительно важным при этом является то, что он не может приблизиться к оси цепочки на расстояние, меньшее, чем параметр экранирования a. Покажем это. Рассмотрим случай, когда  $E_1 > E_c$ . Подставим в правую часть (19), которое определяет равенство между потенциальной энергией взаимодействия на расстоянии наибольшего сближения  $\rho_{\rm m}$  и энергией поперечного движения иона на большом расстоянии, критический угол каналирования (22). Именно при таком угле ион должен сближаться с осью цепочки на наименьшее расстояние при сохранении коррелированности столкновений. В левой части раскроем значение U ( $\rho_{\rm m}$ ), используя (18). Тогда получаем, что  $\ln(Ca/\rho_{\rm m}) = 1$ , откуда  $\rho_{\rm m} = a$  C/e, где e — основание натурального логарифма, а  $C \approx 3^{1/2}$ . Подобным же образом справедливость утверждения, что  $\rho_{\rm m} > a$ , может быть доказано и для случая  $E_1 < E_c$ .

#### 2.4 Плоскостное каналирование

Кроме рядов атомов в кристаллах существуют и атомные плоскости с большой плотностью заполнения атомами. При малых углах скольжения, когда  $E_{\perp}$  иона мала по сравнению с усреднённым потенциалом взаимодействия его с такой плоскостью, ион отражается от неё, не испытывая близких столкновений с атомами. Следуя подходу  $\ddot{\Pi}$ . Линдхарда, можно получить следующее выражение для критического угла плоскостного каналирования ионов больших энергий:

$$\Psi_{\rm cp} = \left(\frac{2\pi Z_1 Z_2 e^2 a d_p n_0}{E_1}\right)^{1/2},\tag{28}$$

где  $d_p$  – расстояние между соседними плоскостями.

Критические углы для подобного *плоскостного каналирования* меньше в 2 -4 раза, чем для осевого каналирования, если сравнивать направления и плоскости с одинаковыми индексами.

Рассмотрим результаты оценки  $\psi_c$  и  $E_c$  для двух случаев для того, чтобы представлять порядок этих величин. При облучении Ge ионами Cs<sup>+</sup> c  $E_1$  = 4 кэВ параллельно направлению <110>, вдоль которого в структуре типа алмаза располагаются наиболее плотноупакованные цепочки атомов,  $\psi_c \approx 3^\circ$ ,  $E_c \approx 10$  МэВ. Для ионов He<sup>+</sup> с энергией 2 МэВ, бомбардирующих Si в том же направлении, -  $\psi_c \approx 0.6^\circ$ ,  $E_c \approx 50$  кэВ.

#### 3. Взаимодействие ионов с монокристаллами

#### 3.1 Каналирование в монокристаллах

До сих пор мы рассматривали взаимодействие ионов с бесконечными цепочками атомов или атомными плоскостями. Реальные кристаллы конечны и ионы проникают в них, пересекая поверхность (границу вакуум-кристалл). Обратимся к рис. 5, где показан участок кристалла, параллельно нормали к поверхности которого располагаются цепочки плотноупакованных атомов. Пусть из вакуума на кристалл параллельно этим цепочкам падают ионы. Атомы, находящиеся на поверхности, не прикрыты со стороны вакуума соседями, поэтому с ними возможны столкновения с любыми прицельными параметрами, а значит они могут рассеиваться и на углы, большие ус. Один из таких ионов обозначен буквой А. Подобные ионы, поскольку их столкновения с атомами твёрдого тела не являются коррелированными, будут двигаться далее, как в неупорядоченном твёрдом теле. Столкновения в этом случае, как и в неупорядоченных веществах, носят случайный характер, поэтому принято называть часть пучка ионов внутри кристалла, которая не взаимодействий, испытывает коррелированных случайной составляющей (в противоположность каналируемой).

Другие ионы могут попадать далеко от центров атомов, которые находятся на поверхности и отклоняться на очень малый угол (ион Б). Для них условия каналирования будут выполняться «с запасом» и они, осциллируя с большой длиной волны между рядами

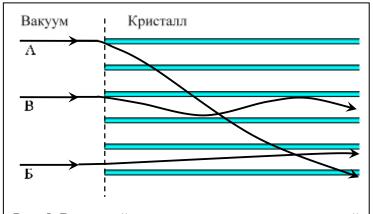


Рис. 5. Взаимодействие ионов с монокристаллической мишенью при нормальном падении пучка ионов вдоль низкоиндексного направления.

атомов (не только в плоскости рисунка), будут приближаться к оси цепочек только на большие расстояния. Глубина проникновения таких ионов в мишень будет существенно больше, чем ионов из случайной составляющей пучка. Здесь большую роль играет не только спрямление траекторий, но и резкое уменьшение величины упругих

*потерь энергии* тормозящихся ионов. Это происходит потому, что близкие соударения для каналированных ионов подавлены, и они не могут передать в соударениях заметную энергию. Уменьшаются и неупругие потери (передача энергии иона электронной подсистеме кристалла), но это происходит не очень сильно, так как электроны «размазаны» по кристаллу<sup>1</sup>.

Наконец, имеются и ионы, которые после пересечения поверхности имеют  $\psi \approx \psi_c$  (ион В нам рис. 5). Они часто подходят к осям цепочек на расстояния, близкие к a, и даже небольшие нарушения регулярности расположения атомов могут приводить к их рассеянию на угол, больший  $\psi_c$ . Столкновения для них перестают быть коррелированными, то есть, происходит *деканалирование ионов*. К деканалированию, включая и хорошо каналируемые ионы (ионы типа Б), могут приводить и дефекты кристаллической структуры. Более подробно этот вопрос будет рассмотрен ниже (см. п. 4.1).

Если направление падения первичного пучка ионов отклоняется от направления плотноупакованных цепочек или плоскостей, доля ионов, попадающих в каналируемый пучок при пересечении поверхности кристалла, уменьшается и становится малой при их взаимной разориентации, большей критического угла каналирования. Однако в реальном случае *полностью* подавить каналирование, изменяя угол падения ионов на кристаллическую мишень, практически очень сложно, так как при любом угле падения велика вероятность того, что условие  $\psi < \psi_c$  будет выполняться для какой либо системы атомных плоскостей или рядов кристалла.

Легко оценить  $\chi_{min}$  - долю всех ионов, перешедших в случайный пучок при облучении ионами вдоль направления атомных цепочек. Действительно, площадь, приходящаяся на одну цепочку на поверхности, равна  $(n_0 \ d)^{-1}$ , где  $n_0$  - концентрация атомов в кристалле, а d - расстояние между атомами в цепочке. Обозначим  $r_c$  прицельный параметр, при котором ион рассеивается поверхностным атомом цепочки на угол  $\psi_c$  в лабораторной системе координат. Попадание иона в пределы круга с радиусом  $r_c$  приводит к рассеянию на угол, больший  $\psi_c$ . Поскольку площадь этого круга составляет  $\pi r_c^2$ , очевидно, доля ионов, перешедших в случайный пучок будет равна отношению этих площадей, или, с учётом того, что положение поверхностных атомов «размазывается» изза тепловых колебаний со средним квадратом отклонения  $r_{th}^{2}$ ,

\_\_\_\_\_

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Другое дело, если речь идёт о передаче энергии сильно связанным электронам, которые локализованы сравнительно близко к ядру. Для их возбуждения нужны близкие соударения, а они запрещены. Из-за этого выход характеристического рентгеновского излучения, Оже-электронов и т.п. в режиме каналирования резко палает

 $<sup>^2</sup>$  В качестве примера, среднеквадратичное тепловое отклонение от равновесного положения атома в кремнии составляет при комнатной температуре  $7.5 \ 10^{-3}$  нм.

$$\chi_{min} = \pi (r_c^2 + r_{th}^2) n_0 d \tag{29}$$

Значения  $\chi_{min}$  зависят от  $Z_1$ ,  $Z_2$ ,  $E_1$  и от ориентации поверхности. Например, для цепочек с низкими индексами Миллера в кремнии и ионов гелия с энергией ~ 1 МэВ  $\chi_{min}$  ~ 1%.

#### 3.2 Распределение внедренной примеси при каналировании

Итак, все ионы пучка, падающего на кристалл, не могут оказаться каналируемыми. На рис. 6 (а) показано распределение по глубине внедрённых ионов  $K^+$  вдоль направления, параллельного плотноупакованным цепочкам атомов. Хорошо видно, наличие глубокого пика, образуемого хорошо каналируемыми ионами (ионы типа Б), и пика относительно близкого к поверхности, который формируется ионами, рассеянными на угол, больший  $\psi_c$ , при пересечении поверхности (ионы типа А). Промежуток между ними заполнен ионами, прошедшими часть пути, как каналируемые, а затем деканалировавшие (в первую очередь, ионы типа В).

Расчёт  $R_{max}$  - положения на распределении внедрённых ионов максимума, соответствующего остановке хорошо каналируемых ионов, в принципе, не представляет трудностей, поскольку ион в этом случае движется практически по прямой и испытывает в основном только неупругие потери энергии. Тогда

$$R_{max} = \frac{1}{n_0} \int_0^{E_1} \frac{dE}{S_e(E)} = \frac{2E_1^{1/2}}{n_0 \tilde{k}_e}.$$
 (30)

Здесь  $S_e = \tilde{k}_e E^{1/2}$  - тормозное сечение электронного торможения, которое учитывает невозможность близких взаимодействий для каналируемых ионов и атомов. Реально, последнее означает, что  $\tilde{k}_e$  и, соответственно,  $S_e$  могут быть меньше, чем эти же величины в аморфных веществах.

Напомним, что для облучения неупорядоченных веществ зависимости  $S_e(Z_I)$  и  $S_e(Z_2)$  при  $v_I = Const$  являются осциллирующими из-за оболочечной структуры распределения электронов в ионах и атомах. Подобные осцилляции имеют место и для  $\tilde{S}_e(Z_I)$  и  $\tilde{S}_e(Z_2)$ , однако амплитуда модуляции является в этом случае существенно большей. Кроме того, установлено, что и сечения торможения не всегда прямо пропорциональны  $E_1^{1/2}$  и показатель степени у  $E_I$  также осциллирует с атомным номером, изменяясь в пределах 0.3 — 0.9, причём положения максимумов и минимумов этого показателя приблизительно совпадают с экстремумами зависимости  $S_e(Z_I)$ .

Если расчёт  $R_{max}$ , как видно, не представляет принципиальной сложности, то предсказать, какое количество ионов достигнет этой глубины, равно, как и вид всего профиля распределения внедрённых ионов по глубине при наличии каналирования

практически невозможно. Прежде всего, это связано с тем, что доля ионов, составляющих каналируемый пучок, и деканалирование таких ионов очень сильно зависят от большого числа параметров, определяемых условиями ионного облучения.

В случае облучения полупроводников и диэлектриков это, в первую очередь, эффективное образование радиационных структурных нарушений. В результате атомные цепочки и плоскости перестают быть регулярными, в каналах появляются атомы И, как следствие, ПО мере накопления дозы всё большая часть каналированных ионов будет испытывать деканалирование. Таким образом, если при внедрении ионов в неупорядоченные

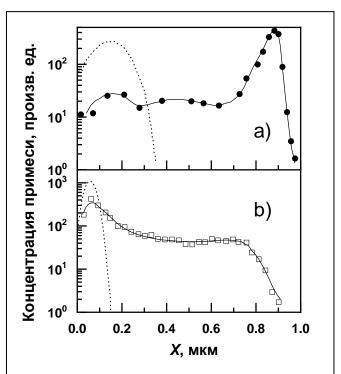


Рис. 6. Экспериментальные распределения по глубине внедрённых ионов при имплантации (а) ионов калия с энергией 0.5 МэВ в монокристалл вольфрама в направлении <111> и (b) ионов фосфора с  $E_1=40$  кэВ в кремний вдоль направления <110>. Пунктир — результаты расчёта распределений для аморфного вещества.

мишени профили их распределения при разных дозах подобны друг другу, исключая случай очень больших доз, то при наличии каналирования это совсем не так и каждой новой порции ионов будет соответствовать свой вид распределения. Всё это осложняется тем, что количественное предсказание распределения устойчивых структурных нарушений по глубине, особенно в случае имплантации лёгких ионов, чрезвычайно сложная задача. Кроме дозы, эффективность введения устойчивых радиационных дефектов зависит от плотности потока ионов, температуры мишени, а также и условий каналирования. Детальное рассмотрение этого вопроса можно найти в книгах [2, 6].

Температура, при которой находится облучаемая мишень, может приводить к изменению распределения каналируемых ионов по глубине, на самом деле, по двум причинам. Одна причина: рост температуры снижает концентрацию вводимых устойчивых нарушений, то есть уменьшает эффективность деканалирования. А вторая, – рост амплитуды тепловых колебаний при повышении температуры вызывает, наоборот, усиление данного процесса.

Другой фактор, приводящий к уменьшению доли пучка, которая попадает в режим каналирования, это наличие «загрязнений» и окислов и т. п. на поверхности. На

составляющих их неупорядоченно расположенных атомах может происходить рассеяние ионов на углы, превышающие  $\psi_c$ , и  $\chi_{min}$  будет расти.

Наконец, в реальном ионном пучке направления движения отдельных ионов не совсем параллельны. Расходимость ионного пучка, если не принимаются специальные меры, может достигать нескольких градусов. Чем больше угол расходимости, тем меньше доля каналированного пучка в кристалле, если первичный пучок был направлен параллельно плотноупакованным цепочкам в кристалле. Кроме того, из-за погрешностей юстировки и само это направление задаётся с конечной точностью. Всё это также неконтролируемо снижает  $\chi_{min}$ .

В результате ряда из приведённых выше причин имплантация ионов в хорошо каналируемые направления в Si — основной материал микроэлектроники — не приводит к образованию на профиле их распределения по глубине чётко выраженного пика каналированных ионов, а проявляется в виде протяжённого «хвоста» (см., напр., рис 6 b), который достаточно резко спадает на глубине, соответствующей пробегу хорошо каналируемых ионов. Ход этого хвоста очень чувствителен к вышеперечисленным условиям.

Таким образом, распределение внедрённой примеси при использовании каналирования ионов чрезвычайно чувствительно ко всем условиям имплантации. А для того, чтобы изготавливаемые с использованием ионной имплантации электронные приборы отвечали необходимым требованиям и их параметры были воспроизводимы, распределения примеси, получаемые в результате облучения, должны быть вполне определённы. Как быть? Создавать сложные ускорители и поддерживать чрезвычайно строго все режимы? Или облучать так, чтобы каналирование было подавлено? Из-за низкой стоимости и простоты выбрали последнее. Просто имплантирующий пучок должен быть направлен к атомным рядам под углом, большим  $\psi_c$ . Обычно это  $\sim 7^\circ$ . С технологической точки зрения оказалось лучше отклонять пучок при таких азимутальных углах, чтобы было подавлено и их каналирование на плотноупакованных плоскостях, нормальных поверхности. Однако ,повторим, что полностью подавить каналирование, изменяя угол падения ионов на кристаллическую мишень, практически очень сложно, так как при любом угле падения велика вероятность того, что условие  $\psi < \psi_c$  будет выполняться для какой либо системы атомных плоскостей или рядов кристалла, пусть и не очень плотных. Кардинальным «лекарством» для подавления каналирования является аморфизация вещества в слое, где тормозятся ионы, путём предварительного облучения ионами, которые не создают электрически активных центров. Например, кремниевые мишени могут быть вначале облучены ионами кремния.

## 3.3 Выход процессов, связанных с близкими взаимодействиями ионов с атомами

Как уже говорилось выше, для ионов в каналируемом пучке близкие взаимодействия с атомами кристалла невозможны. Расстояния наибольшего сближения иона и атомов в цепочке оказываются порядка параметра экранирования а. Это приводит к сильному снижению удельных потерь энергии в упругих взаимодействиях и может несколько уменьшать неупругие потери.

Рассмотрим теперь, как будет зависеть эффективность какого-либо процесса, обусловленного близкими взаимодействиями с атомами, расположенными внутри атомной цепочки, от угла падения первичных ионов на монокристалл. Например, рассеяние ионов на большой угол. К ним также относятся процессы вызванные передачей энергии сильно связанным электронам, то есть тем электронам, которые локализованы сравнительно близко к ядру атомов решетки. Такими процессами, в частности, являются характеристическое рентгеновское излучение, испускание Оже-электронов.

Введём величину Y – относительный выход процесса. Эта величина равна отношению числа актов рассматриваемого процесса В монокристалле к числу таких актов в аморфном веществе, если все условия остальные эксперимента одинаковы. В случае, когда атомы, близкое взаимодействие с которыми приводит к данному процессу, расположены в атомных цепочках, а облучение кристалла ионами идет в направлении, параллельном этим цепочкам, вероятность соответствующего взаимодействия оказывается маленькой. При отклонении от указанного направления она будет вырастать, поскольку эффект цепочек перестает препятствовать взаимодействию ионов атомами, стоящими за первым. Это приводит к

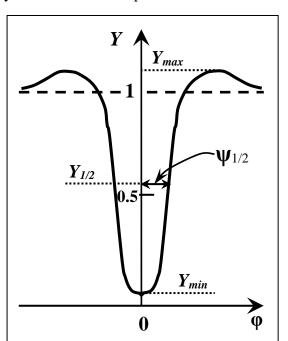


Рис. 7. Зависимость выхода процесса, связанного с близкими взаимодействиями, от угла между направлением падения пучка ионов и направлением цепочек атомов.

появлению минимума на кривой выхода при малых углах С дальнейшим увеличением угла выход понижается и устремляется к значению, соответствующему аморфной мишени, что схематически показано на рис. 7, где нарисована зависимость Y от угла  $\phi$  между направлением падения пучка ионов и направлением цепочек атомов. Горизонтальной пунктирной прямой при Y = 1 изображена зависимость относительного выхода для случая,

когда вместо кристаллического облучалось бы аморфное вещество. Очевидно, значение  $Y_{min}$  равно  $\chi_{min}$ , определяемому из (29), если угол  $\phi = 0$  соответствует нормали к поверхности кристалла.

Наличие «плеч» у зависимости  $Y(\varphi)$  в области относительно больших углов, где Y > 1, показывает, что при  $\varphi > \psi_c$  происходит увеличение вероятности близких соударений по сравнению со случаем облучения неупорядоченного вещества. Причина этого станет понятной при рассмотрении эффекта блокировки (см. 4.2).

Если определять ширину провала на  $Y(\varphi)$  как его полуширину на полувысоте, равной  $(1-Y_{1/2})/2$ , то  $\psi_{1/2}=k_c\psi_c$ , где множитель  $k_c$  составляет от 1 до 2. Типичное значение  $\psi_{1/2}$ 

составляет от нескольких сотых градуса до нескольких градусов, в зависимости от рассматриваемого явления.

В качестве примера, на рис. 8 показаны результаты измерений следующих зависимостей от угла падения ф на монокристаллический Ge ионов калия с энергией 6 кэВ: (а) к – среднего количества электронно-дырочных пар, создаваемых одним ионом; (b)  $\gamma$  – среднего числа электронов, выбиваемых ионом  $K^+$  (коэффициент ионноэлектронной эмиссии); (c) величина, пропорциональная коэффициенту ионно-ионной эмиссии, который определяет среднее число ионов, вышедших из вещества в расчёте на один упавший ион. Стрелками указаны углы падения, при которых направления падения пучка совпадают с низкоиндексными направлениями, параллельно которым располагаются плотноупакованные цепочки атомов. Самые плотноупакованные цепочки в структуре типа алмаза лежат вдоль направлений <110> (см. рис. 1) и именно им соответствуют наиболее ярко выраженные особенности на угловых зависимостях.

Количество электронно-дырочных пар (рис. 8а), генерация которых вызвана электронными потерями энергии ионов, очевидно, прямо пропорционально следующему интегралу  $\int_0^{E_1} S_e (S_n + S_e)^{-1} dE \; ,$  подынтегральное выражение для которого должно

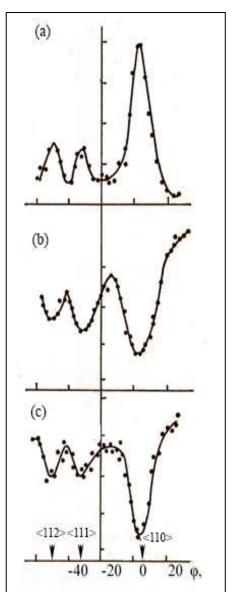


Рис. 8. Зависимости выхода ряда вторичных процессов от угла падения пучка ионов  $K^+$  с энергией 6 кэВ на кристалл германия.[11]

возрастать из-за уменьшения  $S_n$  при приближении направления падения ионов к направлениям цепочек тем сильнее, чем большая доля ионов попадает в каналированный пучок. Это и отражает экспериментальная зависимость.

Удивительный, при сравнении с зависимостью к( $\varphi$ ), результат: уменьшение выхода электронов в вакуум при совпадении направления падения ионов с низко-индексными направлениями (рис. 8b), когда полное число созданных в твёрдом теле свободных электронов, наоборот возрастает (рис. 8a), может быть объяснен с позиций теории каналирования. Действительно, преодолевая поверхностный потенциальный барьер, в вакуум могут выйти только достаточно быстрые электроны, а вероятность их возбуждения при наличии каналирования падает из-за уменьшения вероятности близких соударений. Ход зависимости коэффициента ионно-ионной эмиссии (рис. 8c) также понятен - для передачи энергии, необходимой атому для его выхода в вакуум, тоже необходимы близкие столкновения.

Еще один яркий пример влияния ориентационных эффектов и кристаллической структуры на процессы, связанные с близкими взаимодействиями ионов с атомами мишени приведен на рис. 9. Здесь показана зависимость коэффициента распыления монокристалла меди при облучении ионами криптона с энергией 45 кэВ в зависимости от ориентации пучка и направления <111>. Видно, что при падении вдоль цепочек эффективность распыления гораздо ниже, чем при отклонении от них. Это резко отличается от случая облучения поликристаллической мишени, для которого никаких особенностей на угловой зависимости выхода распыления не наблюдается.

Подобные эффекты, связанные с чувствительностью к положению атомов в элементарной ячейке и состоянию кристаллической структуры, находят широкое применение для анализа локализации атомов примеси и измерения степени совершенства структуры кристаллических мишеней.

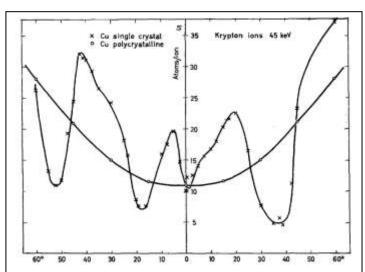


Рис. 9. Коэффициент распыления монокристалла меди от угла поворота относительно оси [100] в плоскости <111>. Направление [111] отстоит от нуля на 3°. Для сравнения показан коэффициент распыления поликристаллической мишени. Облучение ионами криптона с энергией 45 кэВ. [12]

#### 4. Применение ориентационных эффектов

#### 4.1 Резерфордовское обратное рассеяние

При направлении пучка легких частиц (H, He) на поверхность мишени, часть из них рассеивается в обратном направлении. Эти частицы можно регистрировать детектором, расположенным под определённым углом их рассеяния, определяя количество отраженных ионов и их энергетические спектры. Если энергии зондирующих частиц достаточно велики, то при их прохождении через вещество они испытывают потери энергии только в результате неупругих взаимодействий с электронной подсистемой. Условия эксперимента подбираются таким образом, чтобы вклад в регистрируемый сигнал вносили только однократно рассеянные на большой угол частицы. Для описания этого процесса удобно использовать кинематический фактор, полученный на основе Резерфордовского сечения рассеяния. Сечение рассеяния определяется зарядом ядра мишени  $Z_2$  и ядра иона  $Z_1$ , и хорошо известно

$$\sigma(\varphi) = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E_1}\right)^2 \frac{(1 + M_1 / M_2)^2}{\sin^4(\varphi/2)}$$
(31)

где  $E_1$  — начальная энергия иона,  $M_1$  — масса иона,  $M_2$  — масса атома мишени,  $\varphi$  — угол рассеяния в системе центра масс. Для столь легких первичных ионов, как протоны и альфачастицы это достаточно хорошее приближение и для лабораторной системы отсчета. Тогда кинематический фактор K можно записать так:

$$K = \frac{E_1}{E_1'} = \left(\frac{\left(1 - (M_1/M_2)^2 \sin^2 \varphi\right)^{1/2} + (M_1/M_2) \cos \varphi}{1 + M_1/M_2}\right)^2 \tag{32}$$

где  $E_1'$  - энергия иона после столкновения. Таким образом по энергии отраженных ионов можно идентифицировать элементы, составляющие мишень, получая стехиометрию соединений. Подробнее методика рассмотрена, например, в [13]. Однако, при анализе кристаллических образцов методом резерфордовского обратного рассеяния возникают особенности в получении спектров. Пример зависимости выхода обратно-рассеянных ионов Не на монокристалле вольфрама приведен на рис.10. Видно, что, когда зондирующий пучок направлен вдоль низко-индексного направления <100>, количество обратно рассеянных ионов очень мало. При отклонении от этого направления выход растет. Если осуществлять поворот образца в плоскости (100), то на угловой зависимости наблюдается целая серия минимумов, соответствующих попаданию ионов в направлении плоскостных и

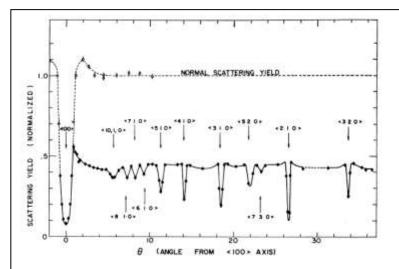


Рис. 10. Зависимости выхода обратно-рассеянных ионов Не на монокристалле W [14] от угла. Точки соответствуют направлению падающего пучка в плоскости (100), а кружки - направление сканирования не лежит ни в одной из плоскостей решетки с плотной упаковкой. Минимумы соответствуют осевому и плоскостному каналированию.

осевых каналов (см.рис.10). В случае. когда отклонение производится в направлении, в котором нет каналов, выход обратно-рассеянных ионов сперва вырастает, а затем с ростом угла выходит на постоянное значение, соответствующее отражению аморфной от мишени. Энергетический спектр отраженных частиц, полученный при отклонении монокристаллического образца

в таком направлении совпадет со спектром, получаемым от аморфной мишени.

Типичная картина, наблюдаемая на энергетических спектрах обратно-рассеянных ионов, полученных от моноэлементной аморфной мишени, или от монокристалла в «случайном» направлении, показана на рис.11 Видно, что если ионы падают на мишень в «случайном» направлении, при значении энергии, соответствующем энергии ионов  $E_1'=$  $KE_1$ , отраженных от поверхностных атомов кристалла (32), начинается и резко возрастает выход обратно-рассеянных частиц. С уменьшением энергии их количество либо практически не изменяется, либо несколько возрастает. Это легко объяснить тем, что, вопервых, - вероятность обратного рассеяния в аморфной мишени практически одинакова в любом параллельном поверхности слое атомов. Действительно, количество атомов в одинаковых по толщине слоях будет одинаковым, но никаких эффектов маскировки более глубоких атомов теми, что расположены ближе к поверхности не будет. Во-вторых количество взаимодействий в приповерхностном слое достаточно невелико, поэтому уменьшение интенсивности падающего пучка пренебрежимо мало. Увеличение выхода обратно-рассеянных ионов на каналируемом и «случайном» спектрах вызвано тем, что по мере прохождения вглубь кристалла ионы теряют энергию на ионизацию и возбуждение электронной подсистемы, что приводит к увеличению сечения рассеяния. Из-за этого постепенно растет число взаимодействий пучка с атомами решетки по мере прохождения ионов вглубь вещества и, следовательно, к увеличивается выход регистрируемых частиц.

На спектре необлученного образца, полученном в направлении канала, видно существенно более низкое количество детектируемых частиц, по сравнению со «случайным» спектром. Первоначальное выхода более высокое значение (наблюдаемое энергий, для соответствующих отражению OT поверхности) называется поверхностным пиком. Вклад в него вносят те частицы, чьи начальные поперечные энергии слишком велики, чтобы они попали в режим

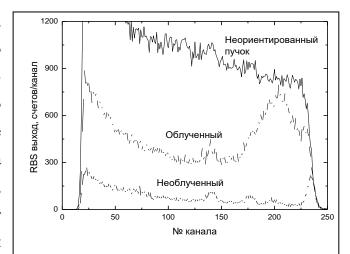


Рис. 11. Типичные RBS/С спектры кремниевой мишени, полученные от облученного и необлученного образца, а также спектр, полученный в «случайном» направлении.

каналирования. Такие частицы могут либо сразу рассеяться в направлении детектора, либо выйти в «случайную» составляющую пучка и также рассеяться в детектор. Остальные частицы проходят в каналы и не могут быть зарегистрированы.

Описанную разницу в выходах обратно-рассеянных ионов при облучении в «случайном» направлении и осевом каналировании удобно использовать для определения дефектности кристаллической структуры. Рассмотрим это подробнее. На рис. 11 изображены характерные спектры обратного резерфордовского рассеяния, полученные при отражении ионов Не с энергией 0.7 МэВ от мишени из кремния при ориентированном падении анализирующего пучка в исходный кристалл в направлении <100>; в том же направлении, но в поврежденную область мишени; а также спектр, снятый при «случайном» падении пучка. Видно, что, как и следовало ожидать, наименьший выход обратного рассеяния наблюдается при попадании пучка в канал необлученного кристалла. В поврежденном образце, например, подвергнутом ионному облучению, выход каналированного пучка оказывается больше, чем был при каналировании в необлученном образце (см. «облученный» спектр на рис. 11). С одной стороны, это вызвано непосредственным взаимодействием анализирующего пучка со значительным числом атомов кристаллической структуры, смещенных в каналы из своих регулярных положений. С другой стороны, смещенные атомы могут отклонить часть каналированного пучка, переводя частицы в неканалируемую компоненту. Таким образом, регистрируемый спектр поврежденного образца содержит частицы, рассеянные от смещенных атомов, и деканалированные обратно-рассеянные ионы. Для определения распределения дефектов по глубине необходимо из спектра облученного образца вычесть спектр необлученного, а также спектр деканалированной составляющей. Доля, которую составляют полученные

величины от спектра «случайного» пучка и будет степенью дефектности кристаллической структуры. Существует ряд алгоритмов, позволяющих находить деканалированную составляющую и получать искомое распределение дефектов.

#### 4.2 Эффект блокировки (эффект теней)

Интересным случаем влияния упорядоченного расположения атомов в кристаллах на характер движения в них ионов является эффект блокировки или эффект теней. Он был открыт независимо А.Ф. Тулиновым [15] в СССР и Д. Джеммелем и Р. Холландом [16] в США в 1965 году. Физическая суть этого эффекта следующая: если положительно заряженная частица стартует из центра атома, который находится внутри атомной цепочки, то из-за действующего со стороны атомов цепочки отталкивающего потенциала движение такой частицы в направлении цепочки оказывается невозможным (блокируется). Это означает, что цепочка создаёт тень на распределении интенсивности вылетевших из монокристалла частиц I от их угла выхода  $\theta_{\rm B}$ . Схематически явление блокировки иллюстрируется рис. 12. То же самое имеет место и для частиц, вылетающих из атомов, расположенных внутри плотноупакованных атомных плоскостей: на зависимости I ( $\theta$ )

возникает минимум - тень от этих плоскостей.

Возможны два варианта появления в кристалле подобных быстрых частиц. Во-первых, они могут возникать из-за ядерных реакций, которые происходят в ядрах атомов. Во-вторых, при рассеянии быстрых ионов на большие углы столкновения являются близкими, то есть в процессе столкновения атом и ион сближаются на столь малые расстояния, что рассеянный ион можно рассматривать как частицу, вылетающую практически из центра атома. В качестве примера, на рис. 13 показана картина (негатив), которая возникла на фотопластинке, помещенной перед монокристаллом вольфрама, облучаемом протонами с энергией 200 кэВ. Рассеянные на

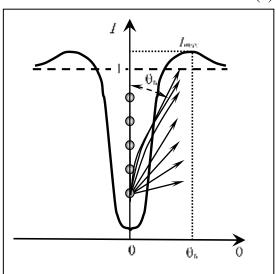


Рис. 12. Зависимость интенсивности потока частиц, выходящих из центра атомов, находящихся внутри атомного ряда (или плоскости), от угла  $\theta$  между направлением этого ряда (плоскости) и направлением выхода. За I=1 принята интенсивность рассеяния при отсутствии блокировки.

большой угол положительные ионы водорода создали картину теней атомных направлений, вдоль которых располагаются атомные цепочки и плоскости. Хорошо видно, что нормаль к фотопластинке была близка к кристаллографическому направлению <001>, то есть к оси симметрии четвёртого порядка для ОЦК-структуры, которая характерна для вольфрама.

Из рис. 12 видно, что зависимость  $I(\theta)$ областях, имеет «плечи» В примыкающих минимуму, где К значение I оказывается выше, плотность потока при отсутствии блокировки. Видно, что рассеянные цепочкой частицы отклоняются некотором диапазоне углов. В этом же направлении движутся частицы, которые не испытали отклоняющего воздействия цепочки. Соответственно полное число частиц ланном

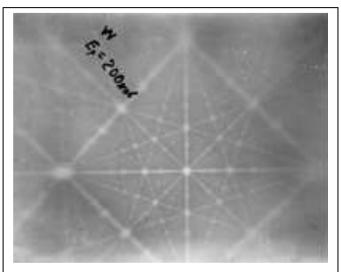


Рис. 13. Картина теней при рассеянии ускоренных протонов на большой угол от кристалла вольфрама (протонограмма) [15].

направлении увеличивается. Схематически это явление изображено в виде сгущения траекторий при значении угла выхода  $\theta = \theta_{\rm B}$ , как показано на рис.13. Отсюда становится ясной и природа «плеч» для зависимостей выхода процессов, которые связаны с близкими взаимодействиями, при каналировании ионов в кристалле (см. рис. 7). Действительно, в классической механике для консервативных систем действует принцип обратимости времени. Это, в частности, означает, что форма траектории частицы не изменится, если сначала она была испущена из точки A и пришла в точку B с определённым значением вектора импульса p, а затем испущена из точки E с противоположным его значением -p. В случае блокировки и каналирования мы и имеем дело с обратимыми процессами. В экспериментах по каналированию исследуется вероятность попадания направленного в вакууме параллельно осям цепочек пучка ускоренных ионов в область, близкую к центрам атомов цепочки. В случае блокировки определяется вероятность попадания ионов, испущенных из центра атомов цепочки в пучок, параллельный оси цепочки вне кристалла. Таким образом, при угле между осью цепочки (или атомной плоскостью) и пучком ионов, несколько большим критического угла каналирования ус, вероятность близких взаимодействий ионов и атомов мишени должна быть больше, чем в случае облучения в неканалированном направлении.

Заметим, что правило обратимости справедливо только при отсутствии потерь энергии иона. При их наличии положительная частица, в общем случае, при прохождении одной и той же точки в противоположных направлениях будет иметь разную энергию. Чем больше эти потери, тем, очевидно, хуже должно выполняться правило обратимости.

# 4.3 Каналирование при прохождении сквозь тонкие мишени. Радужное рассеяние.

Вернемся к рассмотрению явлений, связанных с каналированием в монокристаллах. В случаях, когда направление падающего пучка совпадает с низкоиндексным направлением, а пробег ионов в мишени превышает ее толщину, на экране, расположенном за образцом, можно наблюдать характерные картины, пример которой приведен на рис. 14. Здесь показана звездная картина, полученная за кристаллом Ge толщиной 60 мкм при его облучении вдоль направления <111> протонами с энергией 2.43 МэВ [17]. Пробег таких протонов в аморфном германии составляет ~43 мкм, однако, при попадании в канал пробеги сильно вырастают. На рис. 14 видно изображение осевого и плоскостных каналов. Темные области соответствуют большому количеству упавших на экран частиц. Общий вид подобных картин и распределение интенсивности в них зависят сложным образом от нескольких взаимосвязанных параметров: массы, заряда ядра и энергии бомбардирующих ионов, расходимости пучка, среднеквадратичного угла многократного рассеяния, толщины мишени, вероятности деканалирования и критических углов для различных осей и плоскостей, а также угла падения пучка относительно этих направлений. Самые простые картины, видны только высокосимметричные направления, характерны для довольно

толстых мишеней. В этих случаях многократное рассеяние в кристалле устанавливает псевдоравновесие между выходом частиц вдоль основных направлений каналирования и подачей в них новых ионов, что и приводит к получению картины, подобной той, что показана на рис. 14.

Для еще более тонких кристаллов с высокой степенью совершенства картины, особенно наблюдаемые с помощью хорошо коллимированных падающих пучков, становятся сложными и зависят от особенностей траекторий ионов внутри кристалла. В разделе 3 показано, как происходит взаимодействие ускоренных ионов с атомами в цепочках и плоскостях. Влияние взаимодействия с несколькими атомными цепочками в кристалла, т.е. эффект поперечных корреляций, не учитывался. В то же

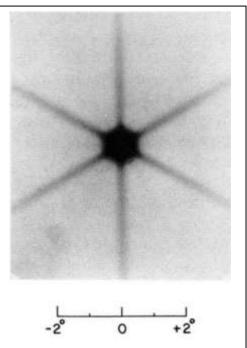


Рис. 14. Звездная картина, полученная при прохождении протонов с энергией 2.43 МэВ через кристалл Ge толщиной 60 мкм вдоль направления <111>.

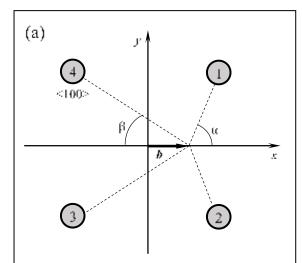


Рис. 15. (а) Схематическое изображение атомных цепочек по оси <100> кремния (расстояние между цепочками 1.92 А. в горизонтальном и вертикальном направлениях). Показан прицельный параметр b, отложенный вдоль оси х от центра канала.

время очевидно, что при движении по каналу ион взаимодействует не с одной, а с несколькими цепочками, которые могут быть по разному пространстве. расположены В Посмотрим подробнее к чему это приводит на примере осевого каналирования. Нас, как и в п. 2.1, будет интересовать функция отклонения иона от его первоначального направления. Для ее получения рассмотрим ион, падающий на аксиальный канал с прицельным параметром b = (x, y), где x, y декартовы координаты, измеряемые от центра канала (см. рис. 15). Пусть он движется параллельно направлению атомных цепочек, определяющих канал, вдоль оси z. Будем

считать, что передаваемый иону поперечный импульс  $P_{\perp}=(p_x,\,p_y)$  очень мал по сравнению с импульсом падающего иона  $P_o$  ( $P_o=p_z$ ), и что кристалл достаточно тонок, так что  $P_{\perp}/P_o$  меньше отношения ширины канала к его длине. В этом случае можно пренебречь отклонением иона к кристалле аппроксимировав его траекторию прямой линией и применить импульсное приближение. Тогда полный поперечный импульс определяется как векторная сумма поперечных импульсов, вносимых каждой атомной цепочкой, окружающей канал:

$$\mathbf{P}_{\perp} = -N \sum_{i=1}^{M} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{\nabla}_{\perp} U_i(x, y, z) dt = \frac{Nm_1}{P_o} \sum_{i=1}^{M} \mathbf{\nabla}_{\perp} V_i(x, y),$$

$$V_i = \int_{-\infty}^{\infty} U_i(x, y, z) dz$$
(33)

где i — номер цепочки, N — число атомов в одной цепочке, M — число цепочек, вносящих существенный вклад (как правило, принимается равным числу цепочек, лежащих в пределах третьей координационной окружности вокруг центра канала), а  $m_1$  — масса иона.  $V_i(x,y)$  — средний поперечный (непрерывный) потенциал для i-й атомной цепочки, основанный на некотором потенциале межатомного взаимодействия  $U_i(x,y,z)$ . Углы, на которые отклонится ион, определим как  $\theta_x = p_x/P_o$ ;  $\theta_y = p_y/P_o$ . Эффективное дифференциальное сечение определяется как якобиан преобразования

$$\sigma(p_x, p_y) = 2m_1 E \sum \left| \frac{\partial b(x, y)}{\partial (p_x, p_y)} \right|,\tag{34}$$

где суммирование ведется по всем значениям (x, y) прицельного параметра b, E – энергия иона. Сечение рассеяния имеет смысл отношения площадей элементов в плоскости

параметра удара b(x, y) и квази-плоскости углов рассеяния  $(\theta_x, \theta_y)$ . Проиллюстрируем особенности, возникающие на этом сечения рассеяния. Рассмотрим осевой канал (100), определяемый четырьмя атомными цепочками, показанными на рис. 15. Ион, входящий в центр канала (b=0), испытывает симметричное отталкивание от каждой из цепочек. При таком взаимодействии никакого поперечного импульса не возникает, и поэтому он будет двигаться по прямой. Если ион входит в точку, смещенную вдоль оси x на некоторое расстояние (b = (x, 0)), направлении у сохраняется условие симметрии (отклонение  $\theta_v =$ 0), но он будет отклоняться в направлении отрицательных углов ( $\theta_r < 0$ ). Если точка входа смещена в отрицательном направлении (x < 0), то отклонение будет происходить в сторону положительных углов ( $\theta_x > 0$ ). С увеличением расстояния x от центра канала отталкивающие силы, создаваемые цепочками 1 и 2 по модулю возрастают, но составляющая этих сил вдоль оси x начнет ослабевать, особенно, когда угол  $\alpha$  становится большим (см. на рис.16). Угол в уменьшается и сумма отталкивающих сил от цепочек 3 и 4 в положительном направлении x увеличивается, несмотря на уменьшение модуля сил отталкивания. При приближении к границе канала силы от цепочек 1 и 2 практически компенсируют друг друга (остаются только 3, 4), но в игру вступают цепочки из соседнего канала справа, которые на границе полностью компенсируют действие цепочек 3, 4. Таким образом, при увеличении прицельного параметра от 0 до края канала векторная сумма отталкивающих сил, действующих на ион, вначале растет, достигает некоторого максимума, а потом спадает обратно до 0. Функция отклонения  $\theta_x(b(x,0))$ , рассчитанная для протонов с энергией 7 МэВ в канал (100) кремния с использованием потенциала взаимодействия Линдхарда (18), показана на рис. 16. Мы видим, что с ростом b(x,0) угол отклонения уменьшается, пока не достигнет минимума (точки поворота) при так называемом радужном угле  $\theta_x = -0.0257^\circ$ , что соответствует x=0.52 нм, а затем увеличивается, пока не достигнет следующей точки поворота в канале справа от канала,

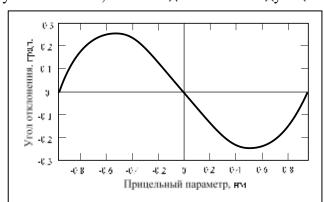


Рис. 16 Функция отклонения  $\theta(b)$  для очень тонкого кристалла при y=0. Функция отклонения имеет экстремумы, которые приводят к появлению радуги.[18]

15. При показанного рис. отрицательном значении xугол отклонения ведет себя аналогично с точностью ДО знака. Конечно, при одновременном изменении обеих координат зависимость  $\theta(b)$  имеет более сложный вид, однако, экстремумы все равно остаются. Физически экстремума означает, что ионы, падающие вблизи ЭТОГО значения прицельного

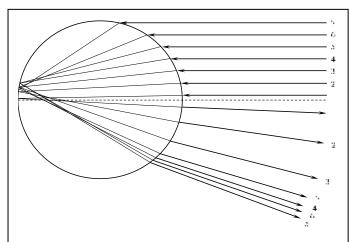


Рис. 17. Ход лучей при отражении света от капли воды. Луч 5 отражается на максимально возможный угол, соответствующий экстремуму функции отражения  $\theta(b)$ . Вблизи него наблюдается сгущение лучей в отраженном пучке. Здесь же формируется яркая радуга.

параметра будут отклоняться практически на один и тот же угол, что приводит к сгущению траекторий и относительному увеличению количества частиц, летящих после взаимодействия в данном направлении.

Этот феномен получил название «радужное рассеяние», поскольку очень похожая картина наблюдается в совершенно другом явлении, хорошо знакомом каждому человеку — отражении солнечного света от капель дождя — радуге. Падающий свет

попадает на отдельные капли в небе, имеющие практически сферическую форму. Наиболее часто наблюдаемый эффект радуги проявляется для лучей, которые входят в каплю с преломлением, один раз отражаются от задней стенки капли и снова выходят из нее с преломлением. Схематически процесс для световых лучей, падающих при разных значениях прицельного параметра изображен на рис. 17. Из него видно, что с ростом расстояния от центра капли угол отклонения сперва увеличивается, потом начинает уменьшаться\*. При построении графика зависимости угла рассеяния  $\theta(b)$  также, ка и в случае рассеяния заряженных частиц в канале, появляется экстремум и  $d\theta/db=0$ . Поскольку интенсивность пропорциональна  $(d\theta/db)^{-1}$ , возникает сингулярность зависимости отраженной интенсивности от угла. Конечно, эту сингулярность невозможно наблюдать в реальности из-за конечной ширины детектора (глаза) и еще ряда ограничений. Фактически она выражается в существенном увеличении интенсивности света, рассеянного в небольшом диапазоне углов вокруг данного направления, где и возникает радуга. Сама радуга четко разделяет угловое распределение отраженного света на яркую внутри радуги и темную снаружи нее части. Выигрыш в интенсивности рассеянного излучения из-за эффекта радуги может быть огромным, а сразу за ней на небе всегда наблюдается темная область, поскольку из нее к наблюдателю свет не приходит (см. рис.17). Линия, разграничивающая темную и светлую области называется «линия радуги». Поскольку капля обладает осевой симметрией, линия радуги на небе представляет собой окружность.

\* Из приведенного описания следует, что могут возникать и радуги более высокого порядка, когда луч

претерпевает больше одного отражения, прежде чем выйти из капли.

30

Окрашивание цвета разные вследствие возникает дисперсии показателя преломления воды, которая дополнительно немного изменяет углы рассеяния зависимости от длины волны при входе и выходе луча из капли. Из более тщательного анализа рассеяния в радуге можно получить показатель преломления воды, а размер капли в классическом анализе не имеет значения.

Вернемся к рассмотрению рассеяния ионов при каналировании в тонких кристаллах. Итак, радужное рассеяние в осевом канале - это, по сути, эффект поперечной корреляции взаимодействий пролетающего иона

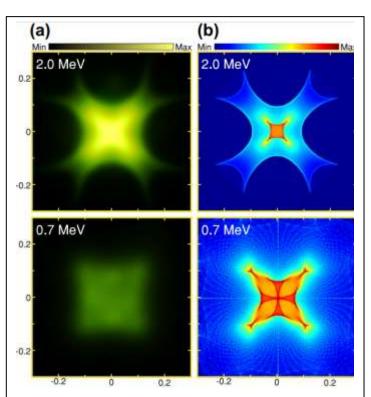


Рис. 18. Экспериментальные картины интенсивности протонов с энергией 2 и 0.7 МэВ, прошедших через (001) кремниевую мембрану толщиной 55 нм и соответствующие теоретические распределения, полученные с помощью потенциала взаимодействия ZBL [19].

с несколькими атомными цепочками. Как и в радуге на небе, при осевом прохождении ионов через тонкий кристалл наблюдаются области с повышенной интенсивностью и темные области. Пример получаемых картин для протонов с энергией 2 и 0.7 МэВ, прошедших сквозь (100) кремниевую мишень толщиной 55 нм приведен на рис. 18 (а). Видно наличие ярких и темных областей разграниченных линией радуги. С ростом энергии форма картины изменяется, отвечая менее сильному отклонению быстро движущихся частиц. Рядом с экспериментальными картнами (см. рис. 19 (b)) показаны модельные распределения интенсивности, рассчитанные с применением потенциала ZBL. При высокой энергии теоретические распределения неплохо совпадают с экспериментальными, а при ее снижении появляются расхождения. Это означает, что с помощью анализа картин каналирования можно определять параметры потенциалов взаимодействия, в частности, параметры функции экранирования.

Очевидно, что с ростом толщины кристалла отклонение увеличивается и аппроксимация траектории прямой перестает быть справедливой и ионы будут совершать осциллирующее движение от цепочки к цепочке. Картины, которые при этом возникают на экране будут циклически эволюционировать. Частота осцилляций будет зависеть от массы иона, его заряда, заряда ядер мишени, расстояния между атомами в цепочках.

Периодичность эволюции углового распределения каналированных ионов с изменением толщины кристалла может быть описана при помощи параметра

$$\Lambda = f_h L /_{v_0} \tag{35}$$

где  $f_h$  — частота осцилляций, L — толщина мишени,  $v_0$  — начальная скорость иона. Частота осцилляций зависит от структуры и расположения цепочек, энергии ионов, Первый цикл эволюции картин длится от  $\Lambda$  равной 0 до 0.5, второй -  $\Lambda$  от 0.5 до 1 и т. д. Эти циклы были названы радужными циклами. Можно сказать, что кристалл очень тонкий, если  $\Lambda < 0.25$ , тонкий или короткий, если  $\Lambda$  находится в интервале от 0.25 до 1, толстый если  $\Lambda > 1$ , и очень толстый или очень длинный, если он намного больше 1. В последнем случае картина становиться все более размазанной и стремиться к показанной, например, на рис.14. Для  $\Lambda = n/2$ , где  $n = 1, 2, \ldots$  - порядок цикла радуги, большая часть пучка параллельна оси канала. Это явление угловой фокусировки называется эффектом нулевой фокусировки каналированных ионов. Для  $\Lambda = (n-1)/2 + 1/4$  ( $n = 1, 2, \ldots$ ) большая часть ионного пучка также направлена вдоль направления пропускания канала, но фокусируется вблизи начала координат в поперечной плоскости (см.рис. 19). Этот эффект пространственной фокусировки называется эффектом суперфокусировки каналированных ионов. Этот эффект

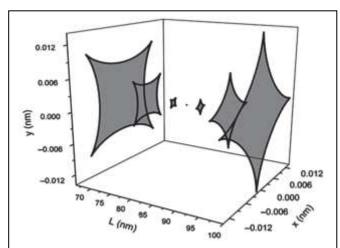


Рис. 19. Эволюция линии радуги в поперечной плоскости в окрестности точки суперфокусировки в первом радужном цикле для протонов с энергией 2 МэВ в (100)-канале кристалла Si. Выбранные значения приведенной толщины кристалла  $\Lambda=0.20~0.22~0.24~0.25~0.26~0.28$  и 0.30, L - толщина кристалла.

позволяет, например, для протонов с энергией 2 МэВ получать в каналах (100) Si пучки с поперечным размером 5-10 пм, что в 10 раз меньше Боровского радиуса протона, равного 52.9 пм. Если такой пучок попадает в атом, находящийся в канале то он может выборочно ионизовать электронные внутренние оболочки. Развитие соответствующей методики должно позволить напрямую исследовать пространственное распределение электронной плотности в атомах.

#### 4.4 Радужное рассеяние при отражении от поверхности

Рассмотрим еще один интересный вариант коррелированного взаимодействия налетающих ионов с кристаллом. На сей раз мы будем облучать мишень не по нормали, а под скользящим углом, почти параллельно поверхности. Если смотреть вдоль низкоиндексного направления, TO на ней обнаруживаются открытые каналы, с которыми также возможно коррелированное взаимодействие. Для примера на рис. 20 показана поверхность монокристалла алюминия (001) и видны открытые каналы в направлении <011> вдоль нее. Очевидно, что в этом случае также возможно коррелированное взаимодействие, достаточно выбрать ориентацию параллельной поверхности составляющей импульса ионов  $P_{\parallel}$ вдоль низкоиндексного направления. Однако, в отличие от каналирования в объеме, поверхности будет происходить только одно отражение от канала, после чего частицы приходят в детектор. В данном случае для описания рассеяния вместо принятых при осевом каналировании «декартовых» углов рассеяния удобно использовать полярный  $\theta$  и азимутальный ф углы сферической системы координат, как показано на рис.21. Ось z направляется вдоль цепочки.

На рис. 22 приведен результат расчета азимутального угла рассеяния при падении ионов Ar с энергией 10 keV на поверхность кристалла <011> A1 осевого направления вдоль потенциала Томаса-Ферми. использованием Видно, что при фиксированном значении поперечной энергии зависимость азимутального

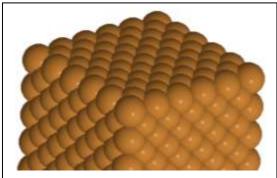


Рис. 20. Чистая поверхность монокристалла алюминия (001). Видны открытые каналы вдоль нее в направлении <011>.

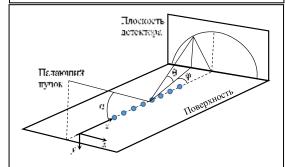


Рис. 21. Геометрия рассеяния на поверхности кристалла при падении под скользящими углами. Для фиксации выходных параметров рассеянных частиц используются полярные координаты.

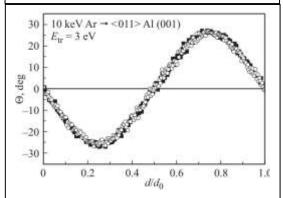


Рис. 22. Зависимость азимутального угла рассеяния от прицельного параметра d ( $d_0$  — расстояние между ближайшими атомными цепочками) при падении ионов Ar с энергией 10 keV на поверхность кристалла Al вдоль осевого направления <011>. Начальная поперечная энергия составляет  $E_{tr} = 3$  eV.

угла рассеяния от прицельного параметра относительно выбранной атомной цепочки имеет ярко выраженные экстремумы (рис. 22), что демонстрирует наличие эффекта радужного рассеяния системой цепочек Ha 23 атомов. рис. показаны экспериментальные угловые распределения (в поперечной плоскости) атомов Ar при тех условиях. Хорошо виден эффект же рассеяния, проявляющийся в радужного боковых симметричных появлении ДВVX пиков и малой интенсивности картины за пределами радуги.

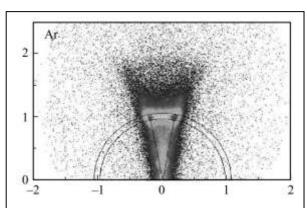


Рис. 23. Угловые распределения (в поперечной плоскости) Аг с энергией 10 keV, рассеянных поверхностью кристалла Al (001) вдоль осевого направления <011> с поперечной энергией  $E_{tr}=3 \text{ eV}$ .

На возникающие угловые распределения рассеянных частиц влияет как структура поверхности (расстояние между атомами в цепочке и между цепочками, тип атомов в цепочке, наличие дефектов), так и характер взаимодействия и процессы протекающие в поверхностном слое кристаллов. Эффект радужного рассеяния оказывается весьма чувствительным к изменениям межатомных потенциалов взаимодействия и структуры приповерхностных слоев. Особенности такого взаимодействия несут ценную информацию о парном потенциале ион-атомного взаимодействия, что позволяет определять вид потенциала для известных геометрических структур поверхностей угловые положения «радуги» подбирая его для наилучшего описания экспериментальных картин. В подобных условиях каналирования процесс рассеяния во-многом определяется поперечной энергией движения по нормали к поверхности.

Помимо этого, при небольших энергиях налетающих частиц наблюдаются и другие эффекты. Например, для атомов (He, Ne), рассеянных от поверхности при небольших полных энергиях частиц (от 1 и до 8 keV), помимо максимумов радужных углов иногда наблюдаются также другие максимумы. Этот эффект связывают с квантовой интерференцией рассеянных частиц. Рассеяние, названное «добавочная радуга» (Supernumerary Rainbow), создается рельефом потенциала поверхности, который дает усиление квантовой интерференции между частицами, отлетающими от поверхности в одном направлении, но отраженными поверхностью в разных точках движения.

#### Библиографический список

- 1. E. P. Wigner *Theoretical Physics in the Metallurgical Laboratory of Chicago* // J. Appl. Phys. 1946. vol. 17. P. 857.
- 2. Мейер Дж., Эриксон Л., Дэвис Дж.. *Ионное легирование полупроводников* // М.: Мир, 1973. 296 с.
- 3. Бор Н. *Прохождение атомных частиц через вещество.*// М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1950.-151 с.
- 4. Lindhard J., Scharff M., *Energy Dissipation by Ions in the kev Region* // Phys. Rev. 1961. Vol. 124. P. 128.
- 5. Lindhard J., Scharff M., Schiott H.E. *Range concepts and heavy ion ranges (Notes on atomic collisions, II).* // Det Kongelige Danske Vindenskabernes Selskab Matematisk-Fysiske Med delelser. 1963. Vol. 33. P. 1–42.
- 6. Аброян И.А., Андронов А.Н., Титов А.И. Физические основы электронной и ионной технологии // М.: Высшая школа, 1984. 320 с.
- 7. Kumakhov M.A. *On the theory of electromagnetic radiation of charged particles in a crystal.* // Phys. Lett. A. 1976. Vol. 57. P. –17.
- 8. Чесноков Ю.А., Афонин А.Г., Баранов В.Т., Бритвич Г.И., Чирков П.Н., Маишеев В.А., Савин Д.А., Терехов В.И. *Применение кристаллических элементов для управления пучками заряженных частиц и генерации направленных потоков излучения на синхротроне У-70* // ЖЭТФ. 2018. т. 154. С. 134.
- 9. Малышевский В.С. Рассеяние быстрых атомов и ионов кристаллической поверхностью. Ориентационные эффекты // Физика твердого тела. –2020. т. 62. С. 1143
- 10. Lindhard J.. *Influence of Crystal Lattice on Motion of Energetic Charged Particles*. // Mater.-Fys. Med. Dan. Vid. Selsk. 1965. Vol. 34. P. 4.
- 11. Аброян И.А., Лавров В.П., Титов А.И., Вторичная эмиссия германия при бомбардировке ионами калия в разных кристаллографических направлениях // Физика твердого тела. 1965. т. 7. № 11. с. 3159.
- 12. Almen O., Bruce G. *Collection and sputtering experiments with noble gas ions* // Nucl. Instr. Meth. 1961. Vol. 11. P. 257.
- 13. Фелдман Л., Майер Д. Основы анализа поверхности и тонких пленок // М.: Мир 1989, 344 c.
- 14. Davies, J. A., J. Denhartog, and J. L. Whitton, *Channeling of MeV Projectiles in Tungsten and Silicon* // Phys. Rev. –1968. v. 165. P. 345.
- 15. Тулинов А.Ф. Об одном эффекте, сопровождающем ядерные реакции на монокристаллах, и о его использовании в различных физических исследованиях // Докл. AH СССР. 1965. т. 162:3. с. 546.
- 16. Gemmell, D. S., and R. E. Holland *Blocking Effects in the Emergence of Charged Particles from Single Crystals* // Phys. Rev. Lett. 1965. v. 14. P. 945.
- 17. Gemmell D.S. Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals // Reviews of Modern Physics. 1974. Vol. 46:1. p. 129.
- 18. H. F. Krause, S. Datz, P. F. Dittner, J. Gomez del Campo, P. D. Miller, C. D. Moak, N. Neskovic, and P. L. Pepmiller. *Rainbow effect in axial ion channeling* // Phys. Rev. B. 1986. Vol. 33. P. 6036.
- 19. Petrovic S., Neškovic N., Cosic M., Motapothula M., Breese M.B.H. *Proton—silicon interaction potential extracted from high-resolution measurements of crystal rainbows* // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 2015. Vol. 360. P. 23.