

# ФЛУКТУАЦИОННЫЙ МЕХАНИЗМ ФОРМИРОВАНИЯ ПРЕРЫВИСТЫХ ТРЕКОВ БЫСТРЫМИ ИОНАМИ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Ф. Ф. Комаров\*, В. А. Белый

*Институт прикладных физических проблем им А. Н. Севченко  
Белорусского государственного университета  
220064, Минск, Республика Беларусь*

Поступила в редакцию 10 апреля 2001 г.

Рассмотрено влияние одно- и многоэлектронных процессов перезарядки быстрых тяжелых ионов на формирование треков в кристаллах. Предложенная модель флуктуации зарядовых распределений дает разумные оценки длины дефектных областей и междефектных промежутков в прерывистых треках. Модифицированная модель термического пика позволяет предсказать радиус треков. На примере облучения кристаллов InP ионами ксенона с энергией 250 МэВ показана адекватность подхода для объяснения всех наблюдающихся особенностей формирования прерывистых и непрерывных треков в этом материале.

PACS: 61.80.-x

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Для быстрых ионов с кинетической энергией  $E > 1$  МэВ/а.е.м. интенсивность выделения энергии в электронную подсистему в  $10^3$ – $10^4$  раз больше, чем в ядерную. Удельные потери энергии на единицу длины пути,  $(dE/dx)_e$ , могут составлять несколько десятков кэВ/нм. Высокая скорость выделения энергии в электронную подсистему твердого тела увеличивает вклад электронных возбуждений в генерацию дефектов структуры, интенсивное неупругое распыление материалов и инициирует ряд специфических эффектов, таких как формирование треков, локальное плавление, аморфизация, создание необычных фаз (фазы высокого давления, нанотрубки, фуллерены), генерация ударных волн и разрушение материалов (см., например, [1, 2]). Наиболее важным для практики (фильтры, сенсоры, детекторы, элементы наноэлектроники [2]) и интересным научным результатом прохождения высокоэнергетических ионов в твердых телах является формирование специфических вытянутых вдоль траектории ионов макродефектов — треков.

Во многих экспериментальных работах (например, [3–7]) по исследованиям процессов трекообра-

зования при облучении материалов высокоэнергетическими ионами наряду с непрерывными треками наблюдались дискретные прерывистые треки, геометрия которых изменялась от квазинепрерывных до бусинкообразных по мере прохождения иона в глубину мишени. Для интерпретации этих данных привлекались различные механизмы [5, 8, 9]. В [9] предполагалось, что треки образуются преимущественно в результате ионизации внутренних оболочек атомов тормозящей среды, который сопровождается интенсивным образованием низкоэнергетических  $\delta$ -электронов. Согласно [9], дискретность треков является следствием дискретности процесса ионизации внутренних электронных оболочек. Тем не менее авторы работы [9] указывают на тот факт, что только малая часть энергии иона может быть высвобождена как результат ионизации внутренних оболочек атомов тормозящей среды и предполагают, что главным «топливом» для трекообразования является непрерывное выделение энергии ионов в электронную подсистему твердого тела. Кроме того, они считают, что на тех участках траектории иона в мишени, где ионизация внутренних электронных оболочек отсутствует, треки вообще не образуются.

В работе [8] дискретность в структуре треков связывается с дискретностью формирования пото-

\*E-mail: komarov@bsu.by

ка электронов вдоль пути иона, обусловленной законом сохранения импульса. Наиболее плодотворной, на наш взгляд, идеей по этой проблеме является предположение Дартига и Зигмунда [5] о том, что среднее число наблюдаемых в треке дефектов напрямую связано с флуктуацией в плотности ионизации, а не с ее средним значением.

## 2. МЕХАНИЗМ ФОРМИРОВАНИЯ ПРЕРЫВИСТЫХ И НЕПРЕРЫВНЫХ ТРЕКОВ

В указанных выше подходах [5, 8, 9] по дискутируемой проблеме не рассматриваются первичные процессы, связанные со статистическими флуктуациями зарядового состояния движущихся в твердом теле ионов за счет процессов обдирки и захвата электронов. А именно флуктуации зарядового состояния иона, по нашему мнению, могут приводить к значительному изменению выделяемых потерь энергии в электронную подсистему на определенных участках траектории иона. Роль этих процессов становится заметной, когда энергия движущегося иона близка к энергии, которой соответствуют пороговые значения средних потерь энергии  $(dE/dx)_e^{th}$  для образования трека.

Таким образом, наблюдаемые в экспериментах прерывистые треки могут быть обусловлены статистическими флуктуациями в процессах перезарядки с потерей ионом одного или нескольких электронов, когда величина  $(dE/dx)_e$  становится на определенном отрезке пути иона больше, чем  $(dE/dx)_e^{th}$  для трекообразования. На начальном участке траектории быстрого иона, когда  $(dE/dx)_e > (dE/dx)_e^{th}$ , формируется непрерывный трек. Средний путь пробега иона до изменения зарядового состояния будет определять длину дефектной области в прерывистом треке и расстояние между такими дефектами. Диаметр же или геометрия дефекта определяется числом оторванных электронов в одном акте. Эта идея весьма кратко обсуждалась нами ранее в работах [10, 11].

Для описания процесса трекообразования чаще всего используют модель термического пика [12–14]. Хотя эта модель демонстрирует качественное соответствие экспериментальным данным, остается вопрос, почему скрытая теплота плавления обычно исключается из рассмотрения. Дискуссионными остаются также вопрос о роли фононов в распространении энергии из высоковозбужденной области и само понятие фононов, когда расчетная температура до-

стигает 2000 К и более. По-видимому, более адекватным является плазменное приближение [15, 16].

Чтобы в полной мере рассмотреть проблему формирования непрерывных и прерывистых треков в твердых телах за счет электронных возбуждений, необходимо вначале выделить два основных процесса диссипации энергии из сильновозбужденной области: а) релаксацию этой области с передачей части энергии в электронную и атомную подсистемы и, затем, б) передачу части энергии из возмущенной атомной области в окружающую матрицу (термализация этой области).

Первый процесс существенно определяется типом материала (металл, полупроводник или диэлектрик), концентрацией электронов в зоне проводимости (на уровне Ферми), их подвижностью, а также зависит от спектра электронных возбуждений [1, 2, 17]. На передачу энергии от электронной подсистемы в атомную также влияют структурные особенности материала: массив, тонкая пленка, размер зерен, а в поликристаллах — концентрация дефектов структуры [1–3, 18, 19].

Процесс термализации и структурные особенности области после «остывания» зависят от типа материала и кристаллической решетки, структурного состояния окружающей матрицы, соотношения объемов для материала в жидкой и твердой фазах, наличия аллотропных фаз [1, 2, 18, 19].

Особенно аккуратно следует рассматривать процессы переноса энергии из возбужденной области вокруг траектории ионов в случае структурно-совершенных кристаллов металлов и узкозонных полупроводников. Действительно, типичное время охлаждения электронной плазмы в металлах за счет электронной теплопроводности не превышает  $10^{-14}$  с даже при температурах плазмы порядка энергии Ферми  $E_F$ , когда температуропроводность электронов минимальна [16], и, таким образом, время охлаждения плазмы меньше, чем типичное время термической осцилляции (порядка  $10^{-13}$  с). Тогда в течение стадии охлаждения электронной плазмы электроны взаимодействуют с практически неподвижными индивидуальными атомами (ионами), а не с коллективными атомными осцилляциями (фононами), т. е. плазменное приближение будет более реалистичным. При наличии границ зерен, дефектов структуры и примесей ситуация с характерными временами электрон-электронной и электрон-фононной релаксаций может радикально измениться [2, 18, 19].

Ниже будет рассмотрена модифицированная модель термического пика для формирования непре-

рывных и прерывистых треков, включающая оба рассмотренных выше процесса диссипации энергии из первичной возбужденной области. В ее основу положено предположение о том, что область вокруг траектории иона является двухкомпонентной плазмой, состоящей из электронов и высокоионизованных атомов мишени. Это приближение подтверждается начальной стадией проникновения иона, вызывающего высокую степень ионизации ближайших к траектории частиц атомов мишени. Современное состояние теории трекообразования позволило учесть только основные из отмеченных выше факторов, определяющих стадии релаксации и термализации возбужденной области.

### 3. ТОРМОЖЕНИЕ И ПРОЦЕССЫ ПЕРЕЗАРЯДКИ

В случае внедрения высокоэнергетических ионов упругие потери энергии играют второстепенную роль и более чем 90 % энергии ион теряет в неупругих столкновениях (т.е. в столкновениях с электронами мишени). Это торможение описывается формулой Бете [20]

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = \frac{4\pi Z_2 Z_{1,eff}^2 e^4 N}{mv^2} \ln \frac{2mv^2}{I}, \quad (1)$$

где  $Z_{1,eff}$  — средний эффективный заряд ионов,  $Z_2$  и  $N$  — соответственно атомный номер и атомная плотность мишени,  $e$  и  $m$  — соответственно заряд и масса электрона,  $v$  — скорость иона,  $I$  — средний потенциал ионизации атомов. Численное интегрирование этого уравнения приводит к представленной на рис. 1 зависимости  $(dE/dx)_e$  от глубины  $x$  для ионов  $\text{Xe}^+$  с  $E = 250$  МэВ (средняя линия на этом рисунке).

В соответствии с результатами экспериментальной работы [4] по трекообразованию в  $\text{InP}$ , облученном ионами  $\text{Xe}^+$  с  $E = 250$  МэВ, высокие потери энергии иона характерны для области формирования непрерывного трека ( $(dE/dx)_e \geq 14$  кэВ/нм на глубинах  $x \leq 7$  мкм), а низкие потери энергии — для области без треков ( $(dE/dx)_e \leq 10$  кэВ/нм на глубинах  $x \geq 10$  мкм). В промежуточной области  $7 \text{ мкм} \leq x \leq 10 \text{ мкм}$  наблюдались прерывистые дискретные треки [4].

Один из процессов, который может приводить к последнему явлению, — флуктуации зарядового состояния движущихся ионов, которые сопровождаются уменьшением или увеличением заряда иона на одну или несколько единиц (соответственно процессы захвата или отдачи электронов).

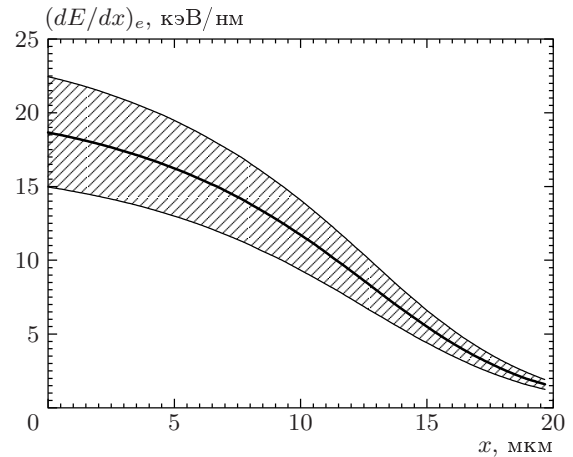


Рис. 1. Зависимость потерь энергии ионами ксенона с  $E = 250$  МэВ от глубины (жирная линия). Заштрихованная область соответствует возможным флуктуациям динамического заряда иона

Для упрощения статистической картины изменения зарядовых распределений ионов по глубине мишени, характерной для большого ансамбля движущихся частиц, рассмотрим роль таких флуктуаций относительно среднего эффективного заряда ионов в формуле (1). Поскольку явления трекообразования и реальная картина трека, регистрируемая методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения, связываются с единичным актуальным ионом, такой подход нам кажется правомерным. Статистическая же природа распределения ионов по зарядам на любой глубине для всего потока частиц проявляется в разбросе характеристик (длина непрерывной и прерывистой частей трека, их диаметры и т. д.) индивидуальных треков относительно средних характеристик.

Хорошо известно (см., например, [20–22]), что быстрый ион, движущийся в твердом теле, теряет часть электронов, так что его заряд может изменяться от нуля до атомного номера  $Z_1$  иона в периодической таблице элементов. Из-за процессов потери/захвата электронов этот заряд не остается постоянным и флуктуирует около своего среднего значения. Только в случае хорошо каналированных ионов их зарядовое состояние может оказаться «замороженным» [21, 23–25] из-за низкой электронной плотности в центральной части канала, в котором движутся ионы.

Для описания процессов перезарядки ионов предложен ряд выражений (см., например, формулы, приведенные в [21, 22]). Пучок ионов, прошедший

через твердое тело достаточной толщины, будет иметь равновесное зарядовое распределение, близкое к гауссову:

$$F_g \approx (2\pi d^2) \exp \left[ -\frac{(g - g_0)^2}{2d^2} \right], \quad (2)$$

которое характеризуется двумя параметрами: средним зарядом

$$g_0 = \sum_g g F_g$$

и полушириной распределения

$$d = \sqrt{\sum_g (g - g_0)^2 F_g},$$

где  $g$  — возможный заряд иона от  $g = 1$  до  $g = Z_1$ .

В широкой области скоростей ионов, где  $g_0 \approx (0.3-0.8)Z_1$ , величина  $d$  практически не зависит от  $v$ . В общем случае  $d$  приблизительно описывается выражением из работы Дмитриева и Николаева [26]:

$$d = d_1 \sqrt{g_0 [1 - (g_0/Z_1)^k]}, \quad (3)$$

где  $d_1 = 0.5$ ,  $k = 0.6$ .

Часто наблюдаемая асимметрия экспериментального распределения (2), а также его бóльшая, чем предсказываемая выражением (2), ширина в основном обусловлены процессами многоэлектронных потерь в одном столкновении.

В данном рассмотрении проблемы средний эффективный заряд ионов  $Z_{1,eff}$  будет находиться из полуэмпирического выражения из [26], а его флуктуации — по формуле Бора [20]:

$$g_0 = Z_1 \left[ 1 + \left( \frac{1}{Z_1^\alpha} \frac{v}{v'} \right)^{-1/k} \right]^{-k}, \quad (4)$$

$$\sigma_0 \approx \pi a_0^2 (Z_1^{1/3} + Z_2^{1/3}) (v_0/v)^2,$$

где для оценок предполагается, что  $g_0 \approx Z_{1,eff}$  (более строгое соотношение между этими величинами приведено в [27]),  $\sigma_0$  — сечение захвата/потери электрона,  $v' = 3.6 \cdot 10^6$  м/с и  $\alpha = 0.48$  — параметры модели,  $v_0 = 2.19 \cdot 10^6$  м/с и  $a_0 \approx 0.053$  нм — соответственно боровская скорость и боровский радиус. Для ионов ксенона с  $E = 250$  МэВ в InP в области дискретного трека эти формулы дают значения  $g_0 \approx 25$ ,  $\sigma_0 \approx 1.8 \cdot 10^{-17}$  см<sup>2</sup>.

Следует отметить, что результаты наших расчетов [27–30] распределений внедряемых ионов по пробегам с учетом флуктуаций зарядовых состояний показывают достаточно большие глубины  $x$ , на

которых устанавливаются равновесные зарядовые распределения. Так,  $x \approx 0.8$  мкм для ионов В<sup>+</sup> с  $E = 50$  МэВ в кремнии и  $x = 1$  мкм для ионов Ni<sup>+</sup> с  $E = 59$  МэВ в алмазе. С ростом  $Z_2$  глубина  $x$  уменьшается, таким образом, и для ионов Хе<sup>+</sup> с  $E = 250$  МэВ в InP на начальном участке траектории ионов после входа их в кристалл средний заряд будет сильно отличаться от  $Z_{1,eff}(E)$ , а следовательно, и потери энергии иона на единицу пути  $(dE/dx)_e$  будут значительно меньшими, чем предсказываемые выражением (1). Этим обстоятельством могут быть вызваны наблюдавшиеся нами [4, 7, 28] отсутствие треков и слабая нарушенность в приповерхностной области кристалла ( $x \leq 35$  нм), а также наличие прерывистых треков на участке от  $x = 35$  нм до глубин  $x \approx 100$  нм. И только с глубины  $x \geq 100$  нм наблюдаются непрерывные треки до  $x \approx 7$  мкм. Прерывистые треки повторно наблюдались на глубинах  $7 \text{ мкм} \leq x \leq 10 \text{ мкм}$ , когда величины  $(dE/dx)_e$  становятся близкими или меньшими  $(dE/dx)^{th}$ . Толщины обсуждаемых областей для энергий ионов ксенона  $E = 340$  МэВ увеличиваются примерно пропорционально отношению начальных энергий ионов [28], т. е. в  $\eta = 340/250 = 1.36$  раз.

Согласно (1), даже небольшие изменения эффективного заряда могут приводить к значительным флуктуациям потерь энергии иона. Например, потеря/захват одного электрона приводит к осцилляциям около 8% величины  $(dE/dx)_e$  ( $(g_{max}/g_{min})^2 \approx 1.08$ ,  $g_{max}$  и  $g_{min}$  — заряд иона после процесса перезарядки соответственно с потерей или захватом электрона), в то время как потеря/захват трех электронов ведет к осцилляциям до 30%. Заштрихованная область на рис. 1 изображает возможные потери энергии, если рассматривается потеря/захват до двух электронов. Эти оценки, наряду с имеющимися экспериментальными данными, позволяют предложить следующую модель.

На малых расстояниях от поверхности мишени, где не завершился процесс установления равновесного распределения потока ионов по зарядам, потери энергии могут быть ниже пороговых для трекообразования. На этих глубинах формируются простые точечные дефекты и их комплексы. Как известно, поверхность кристалла является эффективным стоком для таких дефектов, что и вызывает существенное подавление конечной концентрации дефектов структуры. При увеличении глубины проникновения потока ионов многоэлектронные процессы перезарядки приводят к флуктуациям среднего заряда, когда  $(dE/dx)_e > (dE/dx)^{th}$  (т. е. потери энергии на определенном участке траектории иона становятся

больше пороговых потерь энергии для трекообразования). Длина свободного пробега иона в более высоком зарядовом состоянии определяет длину дефектного участка прерывистого трека. Еще раз акцентируем внимание на то, что ряд положений статистической теории прохождения потока ионов в твердых телах переносится на случай единичного иона (т. е. «среднестатистического» иона). На участке непрерывного трека значения  $(dE/dx)_e$  значительно превышают  $(dE/dx)^{th}$ . Когда потери энергии приближаются к пороговым для трекообразования (им может соответствовать такой процесс, как, например, расплавление локальной области), осцилляции торможения за счет процессов перезарядки ионов приводят к частым пересечениям этого порога, а следовательно, к формированию прерывистого трека. На больших глубинах такое пересечение становится редким и коротким по времени, т. е. формируются редкие и короткие дефектные области. Необходимо отметить здесь значительную роль редких лобовых или почти лобовых упругих столкновений иона с атомами среды, стимулирующих процессы перезарядки с потерей нескольких электронов. На больших глубинах основную роль начинают играть процессы упругих столкновений ионов с атомами среды, приводящие к формированию обычных дефектов структуры и аморфных областей.

Для подтверждения этой модели выполнены расчеты среднего размера дефектов в прерывистых треках. Как указано выше, длина их равна расстоянию свободного пробега иона до следующей перезарядки. Вероятность этого процесса на расстоянии  $x$  рассчитывается из выражения

$$p = N\sigma x,$$

где  $N$  — плотность атомов мишени,  $\sigma$  — полное сечение перезарядки. Тогда длина дефекта в прерывистом треке определяется как  $\lambda = 1/N\sigma$ . Это значение  $\lambda$  с учетом только одноэлектронных процессов перезарядки в два-три раза меньше размера наблюдаемых дефектов [4, 7, 28] в прерывистом треке. В соответствии с результатами из обзора Бетца [20] относительная вероятность для многоэлектронных процессов перезарядки быстрых ионов по сравнению с одноэлектронными составляет около 60 % для потерь/захвата двух электронов, 40 % для трехэлектронных процессов, 20 % для четырех электронов и т. д. Многоэлектронные процессы приводят к высоким флуктуациям в энергетических потерях (см. выражение (1)). При рассмотрении двух- и трехэлектронных потерь расчетная длина дефектов становится приблизительно в два-три раза большей, чем

получается при учете одноэлектронных процессов, что качественно и количественно соответствует экспериментальным результатам из [3, 4, 7, 28] по длинам регистрируемых дефектных областей.

Следует отметить, что разработанная нами теория для распределения ионов по пробегам с учетом флуктуаций зарядовых распределений ионов [27, 29, 30] позволила значительно улучшить соответствие теоретических профилей распределения внедренных атомов по глубине мишени с экспериментом (достигнуто увеличение ширины распределений до 1.5–5 раз) по сравнению с традиционными расчетами без учета этого эффекта [31]. Однако и в этом случае теоретические профили оказывались всегда более узкими, чем наблюдавшиеся экспериментально. В нашей теории [27, 29, 30] учитывались только одноэлектронные процессы перезарядки. По-видимому, роль многоэлектронных процессов перезарядки важна и для такой комплексной проблемы, как распределение высокоэнергетических ионов по пробегам в твердом теле. Учет многоэлектронных процессов существенно влияет на ширину зарядовых распределений для потока ионов как функции глубины в мишени.

#### 4. МОДЕЛЬ ТРЕКООБРАЗОВАНИЯ

На своем пути в мишени частица создает определенное число горячих электронов. Если вся энергия передается атомам, то при энергиях иона ксенона  $E = 250$  МэВ цилиндрическая область с радиусом около 25 нм может быть расплавлена. Тем не менее некоторая часть электронов ( $\delta$ -электроны) приобретает достаточную кинетическую энергию для ухода на большие расстояния от траектории иона. Поскольку суммарная энергия таких электронов значительна, сформированный трек будет более тонким. Для учета этого процесса необходимо знать начальное распределение возбужденных электронов. Свободные электроны в области трека появляются в результате неупругих столкновений между налетающей частицей и атомами мишени. В этих столкновениях налетающая частица возбуждает некоторую часть слабо связанных с ядром электронов в атомах мишени. Поскольку энергия этих электронов  $E_e$  значительно меньше, чем энергия  $E$  налетающей частицы с массой  $M_1$ ,

$$E_{e,max} = \frac{4M_1m}{(M_1 + m)^2}E \approx \frac{4m}{M_1}E,$$

можно использовать формулу Резерфорда для описания энергии, передаваемой одному электрону [32]:

$$\varepsilon = \varepsilon_{max} / (\chi r^2 + 1), \quad (5)$$

$$\chi = (4\pi\varepsilon_0 m v^2 / Z_1 e^2)^2, \quad (6)$$

$$\varepsilon_{max} = 2m v^2, \quad (7)$$

где  $r$  — прицельный параметр столкновения,  $v$  — скорость иона,  $\varepsilon_{max}$  — максимальная энергия, которую получает отдельный электрон,  $\varepsilon_0$  — диэлектрическая константа.

Максимальное расстояние, на котором еще имеет место неупругое столкновение иона с передачей энергии электронам, определяется энергетической щелью полупроводника:

$$r_{max} = \sqrt{\frac{1}{\chi} \left( \frac{\varepsilon_{max}}{\varepsilon_g} - 1 \right)}, \quad (8)$$

где  $\varepsilon_g$  — ширина запрещенной зоны.

На малых расстояниях неупругие столкновения возможны и зависят от расстояния между сталкивающимся атомом и ионом. Вычисления показывают [21], что налетающая частица в кристалле InP возбуждает в основном три-пять внешних электронов, которые соответствуют всем электронам во внешней оболочке атомов индия и фосфора. Это означает, что возбуждение любого дополнительного электрона из более глубокой электронной оболочки требует намного больших затрат энергии и поэтому маловероятно. Таким образом, в дальнейших вычислениях предполагается, что все рассматриваемые атомы мишени теряют равное число электронов  $k_a$ . В этом случае распределение энергии возбужденных электронов может быть найдено из выражения

$$n(\varepsilon) d\varepsilon = 2\pi r k_a n dr,$$

где  $n(\varepsilon)$  — плотность энергии возбужденных электронов на единицу длины траектории иона. Подставляя выражение (5), получим

$$n(\varepsilon) = \frac{\pi k_a n \varepsilon_{max}}{\chi (\varepsilon_g + \varepsilon)^2}. \quad (9)$$

Полная энергия, переданная электронам, равна потере энергии частицей на единицу пути:

$$\int_0^{\varepsilon_{max}} (\varepsilon + \varepsilon_g) n(\varepsilon) d\varepsilon = \left( \frac{dE}{dx} \right)_e,$$

что приводит к выражению

$$k_a = \frac{\chi (dE/dx)_e}{\pi n \varepsilon_{max} \ln(\varepsilon_{max} / \varepsilon_g)}. \quad (10)$$

При записи выражения (10) мы не учитываем в первом приближении вклада плазмонов, т. е. коллективных плазменных возбуждений в твердых телах, а следовательно, несколько переоцениваем роль одночастичных возбуждений. Корректировку можно выполнить путем вычитания из выражения (10) для  $(dE/dx)_e$  вклада плазмонов [21], который рассчитывается по формуле

$$\left( \frac{dE}{dx} \right)_{pl} = \frac{4\pi Z_1 e^4 N n_0}{m v^2} \ln \frac{v}{v_F},$$

где  $n_0$  — число валентных электронов на атом,  $v_F$  — скорость Ферми электронов.

Для области прерывистых треков в InP, когда потери энергии составляют от 10 до 14 кэВ/нм, коэффициент  $k_a = 3-5$ . Это подтверждает приведенное выше предположение, что участвующие в столкновениях атомы мишени теряют все электроны из внешних оболочек.

Возбужденные электроны обладают радиальной составляющей скорости и таким образом пытаются уйти из возбужденной области вокруг траектории. Нескомпенсированный положительный заряд, создаваемый вблизи траектории иона за счет ухода части электронов из области трека, будет действовать как притягивающая сила для всех электронов. Если этот заряд считать однородно распределенным внутри цилиндрической области  $r_0$ , то потенциальная энергия любого электрона в установившемся электрическом поле запишется как

$$\varphi(g, r) = \frac{g e^2}{4\pi \gamma \varepsilon_0} \begin{cases} (r/r_0)^2 & r < r_0, \\ 2 \ln(r/r_0) + 1, & r > r_0, \end{cases} \quad (11)$$

где  $g e$  — линейная плотность заряда в этой области,  $r$  — расстояние от траектории иона,  $\gamma \varepsilon_0$  — диэлектрическая проницаемость мишени.

Вначале все электроны, имеющие большую энергию и заметную составляющую поперечной энергии ( $E_{\perp} = m v_{\perp}^2 / 2$ , где  $v_{\perp}$  — составляющая скорости электрона, перпендикулярная траектории иона), уходят значительно дальше от траектории иона, чем электроны с более низкой энергией. Таким образом, любой индивидуальный электрон будет притягиваться нескомпенсированным зарядом, созданным за счет ухода быстрых электронов из области вблизи траектории иона:

$$g(\varepsilon) = \int_{\varepsilon}^{\varepsilon_{max}} n(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (12)$$

Каждый быстрый электрон будет двигаться от траектории иона до тех пор, пока вся его кинетическая

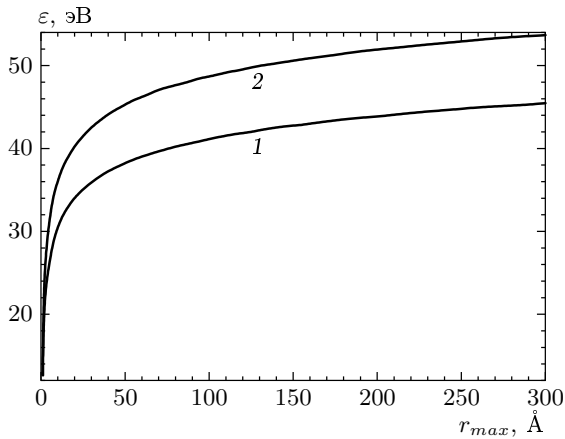


Рис. 2. Соотношение между начальной энергией электрона и его максимальным удалением от центра трека на начальном этапе при потерях энергии 10 кэВ/нм (1) и 14 кэВ/нм (2)

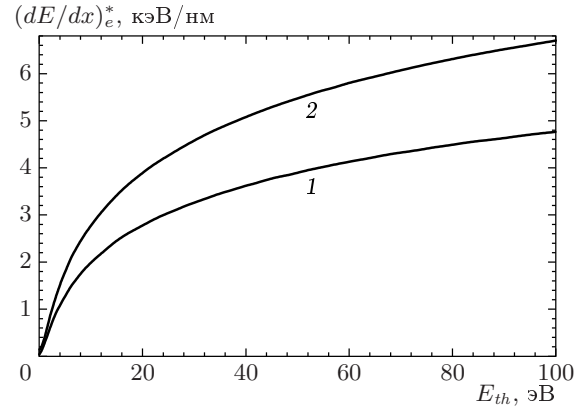


Рис. 3. Полная энергия электронов, остающихся в области трека и участвующих в его формировании, как функция пороговой энергии  $E_{th}$  при потерях энергии 10 кэВ/нм (1) и 14 кэВ/нм (2)

энергия не перейдет в потенциальную. Подставив выражения (12) и (9) в (11), получим зависимость, приведенную на рис. 2.

Остановившиеся электроны притягиваются обратно в область первоначальных возбуждений за счет кулоновской силы. Тем не менее кулоновского притяжения недостаточно для возврата некоторых далеко ушедших электронов, которые или захватываются на генетические дефекты (дефекты роста) структуры, или теряют энергию, приобретенную от приложенной кулоновской силы, в электрон-фононных взаимодействиях. Таким образом, для выделения электронов, которые не участвуют в дальнейшем формировании трека, может быть введена некоторая феноменологическая энергия  $E_{th}$ , которая зависит от свойств материала мишени (плотность, ширина запрещенной зоны,  $Z_2$ ), но в то же время не является константой для выбранного материала, а зависит от величины  $(dE/dx)_e$ , а при одинаковых  $(dE/dx)_e$  — от скорости иона. При более низких скоростях ионов (например, кластерных ионов, ионов фуллеренов) доминируют низкоэнергетические возбуждения электронов и практически все возбуждаемые электроны остаются в области локализации будущего трека.

Из рис. 2 эта энергия может быть оценена как  $E_{th} \approx 40$  эВ для  $(dE/dx)_e = 10$  кэВ/нм и  $E_{th} \approx 50$  эВ для  $(dE/dx)_e = 14$  кэВ/нм.

Как отмечалось выше, введение пороговой энергии электронов приводит к тому факту, что часть энергии из возбужденной области уносится быстрыми электронами и далее не участвует в форми-

ровании дефектной (трековой) области. Энергия  $(dE/dx)_e^*$ , оставшаяся внутри трека, может быть получена путем интегрирования выражения (10) с верхним пределом  $E_{th}$  (рис. 3). Из рис. 3 следует, что только около половины энергии, выделенной ионом в электронную подсистему, идет на формирование трека, в то время как согласно расчетам около 97–98 % возбужденных электронов остается внутри трековой области. Следует отметить, что оценка части выделенной энергии, идущей на формирование трека, является нижним пределом, так как в явном виде не учтено угловое распределение  $\delta$ -электронов.

### 5. ФОРМИРОВАНИЕ РАВНОВЕСНОГО ЭЛЕКТРОННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Когда небольшая часть (несколько процентов) горячих электронов уходит из области трека, оставшиеся электроны участвуют в случайном движении с частыми столкновениями. Поскольку электронная плотность очень высока (свыше  $10^{23}$  см<sup>-3</sup>), характеристическое время этих столкновений очень мало и не превышает  $10^{-14}$  с. Таким образом, за время более  $10^{-14}$  с для описания системы свободных электронов можно использовать распределение Максвелла–Больцмана (классическое представление функции распределения обусловлено относительно высокой энергией электронов (несколько электронвольт)):

$$f(\varepsilon) = f_{00}e^{-\varepsilon/T}, \tag{13}$$

здесь  $T$  — электронная температура,  $f_{00}$  — нормировочная константа. Величина константы  $f_{00}$  и температура  $T$  могут быть определены из общего числа  $N_{left}$  возбужденных электронов в трековой области и их общей энергии  $E_{left}$ :

$$\int_0^{R_{max}} 2\pi r dr \int_{\varphi(r)}^{E_{th}} f(\varepsilon) q(\varepsilon, r) d\varepsilon = f_{00} \int_0^{R_{max}} r dr \int_{\varphi(r)}^{E_{th}} (\varepsilon - \varphi(r))^{1/2} e^{-\varepsilon/T} d\varepsilon = N_{left}, \quad (14)$$

$$\int_0^{R_{max}} 2\pi r dr \int_{\varphi(r)}^{E_{th}} \varepsilon f(\varepsilon) q(\varepsilon, r) d\varepsilon = f_{00} \int_0^{R_{max}} r dr \int_{\varphi(r)}^{E_{th}} \varepsilon [\varepsilon - \varphi(r)]^{1/2} e^{-\varepsilon/T} d\varepsilon = E_{left}, \quad (15)$$

где

$$q(\varepsilon, r) = g_0^* [\varepsilon - \varphi(r)]^{1/2}, \quad (16)$$

$$R_{max} = \left( \frac{4\pi\gamma\varepsilon_0 E_{th}}{g_0^* e^2} \right)^{1/2} r_0,$$

где  $q(\varepsilon, r)$  — плотность состояний,  $f_0$  — новая нормировочная константа,  $R_{max}$  — максимальное расстояние от траектории иона, на которое может удалиться электрон с энергией  $E_{th}$ . Наиболее важная область для трекообразования располагается вблизи траектории иона, следовательно, можно пренебречь логарифмической частью в потенциальной энергии в уравнении (11):

$$\varphi(r) = \frac{g_0^* e^2}{4\pi\gamma\varepsilon_0} \left( \frac{r}{r_0} \right)^2, \quad (17)$$

$$g_0^*(\varepsilon) = \int_0^{E_{th}} n(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (18)$$

где  $g_0^*$  — общее число электронов, участвующих в дальнейшем образовании трека.

Интегрирование выражений (14)–(18) показывает, что в случае облучения InP ионами ксенона с энергией порядка 100 МэВ имеет место линейная зависимость между электронной температурой и средней энергией электронов:

$$T \approx 2.5 E_{left} / N_{left} \quad (19)$$

и, таким образом, начальная температура горячих электронов близка к 1.2 эВ (14000 К).

## 6. НАГРЕВ И ПЛАВЛЕНИЕ ЛОКАЛЬНЫХ ОБЛАСТЕЙ

Суммируя сказанное выше, отметим, что область мишени, близкая к траектории быстрого иона, напоминает двухкомпонентную плазму. Она состоит из высокоионизованных атомов мишени и горячих электронов. Тем не менее температуры этих компонент сильно различаются, и включается процесс передачи энергии от электронов к атомам. Скорость этой передачи можно описать как

$$\frac{dQ}{dt} = \int_0^{R_{max}} 2\pi r dr \int_{\varphi(r)}^{E_{th}} f(\varepsilon) q(\varepsilon, r) \times \int_0^\varepsilon EN v_1(\varepsilon) d\sigma(E), \quad (20)$$

где  $N$  — атомная плотность мишени,  $v_1(\varepsilon) = \sqrt{2\varepsilon/m}$  — скорость электронов,  $d\sigma(E)$  — дифференциальное сечение электрон-атомного рассеяния с передачей энергии  $E$ . В соответствии с формулой Резерфорда [32] имеем

$$d\sigma(E) = \frac{\pi m (k_a e^2)^2}{(4\pi\varepsilon_0)^2 M_2 [\varepsilon - \varphi(r)]} \frac{dE}{E^2}, \quad (21)$$

где  $M_2$  — масса атома мишени,  $k_a$  — средний заряд ионизованных атомов мишени (см. (9)),  $\varepsilon - \varphi(r)$  — кинетическая энергия электрона с полной энергией  $\varepsilon$ .

После подстановки (21) в (20) скорость передачи энергии атомам от электронов с температурой меньше 2 эВ запишется как

$$\frac{dQ}{dt} = \mu T^2, \quad (22)$$

где коэффициент  $\mu \approx 1 \cdot 10^{-17}$  эВ $^{-1} \cdot$  с $^{-1}$ . Совместно с (19) это приводит к следующему выражению для полной энергии в электронной подсистеме как функции времени:

$$E_{left}(t) = \frac{1}{E_{left,0}^{-1} + \lambda t}, \quad (23)$$

где  $\lambda = \mu / (2.5 N_{left})^2$ ,  $E_{left,0}^{-1}$  — энергия электронного газа при  $t = 0$ . Эта зависимость, нормированная на единицу длины пути ( $dE_{left}/dx$ ) ионов ксенона с  $E = 100$  МэВ в InP, представлена на рис. 4, из которого видно, что в течение первых  $10^{-12}$  с около 5 кэВ энергии передается от электронов атомам мишени. Для изучения влияния этого процесса на мишень



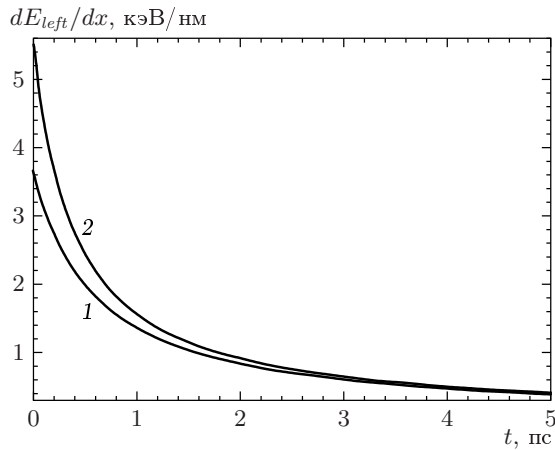


Рис. 4. Зависимость полной энергии электронного газа от времени при потерях энергии 10 кэВ/нм (1) и 14 кэВ/нм (2)

(процесс термализации возбужденной области) может быть использовано уравнение нестационарной теплопроводности:

$$C\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \xi \nabla^2 T + \frac{dQ_V}{dt}, \quad (24)$$

где  $C$ ,  $\rho$ ,  $\xi$  и  $T$  — соответственно удельная теплоемкость, плотность, теплопроводность и температура мишени, а  $dQ_V/dt$  — плотность энергии, переданной атомам.

Решение этого уравнения дает следующее выражение для температуры на различных расстояниях от траектории ионов [3, 13]:

$$T(r, t) = \int_0^t \frac{dQ/dt}{4\xi\pi(t-\tau)} \exp\left(-\frac{C\rho r^2}{4\xi(t-\tau)}\right) d\tau. \quad (25)$$

На рис. 5 представлены зависимости  $T(r, t)$  с учетом того, что вся энергия идет на нагрев, но плавления не происходит. Это было бы неверным для реального кристалла, в котором после нагрева до температуры 1350 К происходит плавление. Тем не менее в настоящем случае и не требуется, чтобы мишень расплавилась. Трек может быть сформирован при получении достаточно большой порции энергии после достижения точки плавления. Действительно, эта добавка энергии может приводить к смещению нескольких ближайших атомов, так что конечная структура в области вокруг траектории иона будет отличаться от исходной, а трек можно зарегистрировать методами электронной микроскопии высокого разрешения.

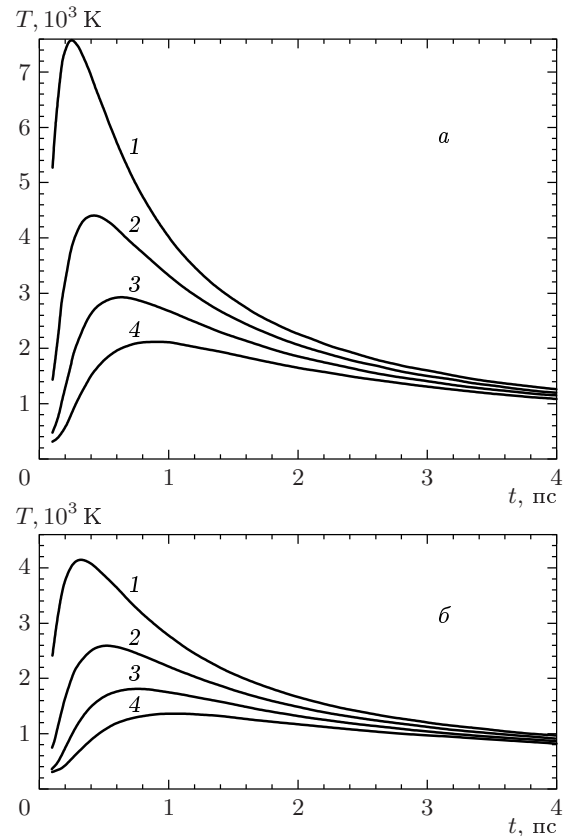


Рис. 5. Временные зависимости температуры мишени при потерях энергии 10 кэВ/нм (а) и 14 кэВ/нм (б) на различных расстояниях от центра трека: 1 — 2 нм; 2 — 3 нм; 3 — 4 нм; 4 — 5 нм

Тем не менее энергия, необходимая для смещения атомов, сильно зависит от радиуса нагретой области. Чем меньше ее радиус, тем большая энергия необходима, и можно ожидать, что требуемая температура для активации такого процесса будет значительно выше 1350 К. Таким образом, расчетные величины  $T$  из выражения (25) слишком малы, и в области потерь энергии, где  $(dE/dx)_e \leq 10$  кэВ/нм, трекообразование не наблюдается (рис. 5а). Наоборот, если потери энергии достигают примерно 14 кэВ/нм (рис. 5б), нагретый район оказывается достаточно широким, и пороговая энергия для смещения атомов из равновесного положения может быть значительно меньшей, чем в предыдущем случае. Температура, несколько превышающая температуру плавления, будет достаточна для расплавления локальной квазицилиндрической области и трекообразования на стадии резкого ее охлаждения.

Результаты расчетов (рис. 5б) свидетельствуют о том, что для  $(dE/dx)_e = 14$  кэВ/нм радиус трека

может достигать 4–5 нм и более, что хорошо согласуется с экспериментальными данными [4, 28] (на глубинах от 100 нм до 10 мкм в InP диаметр треков, создаваемых ионами ксенона с начальной энергией 250 МэВ, изменялся от 7 до 15 нм).

## 7. ВЫВОДЫ

Таким образом, обсуждаемая модель описывает образование как непрерывных, так и прерывистых треков. Учет эффекта флуктуаций зарядового состояния ионов, включая многоэлектронные процессы, позволил вычислить глубины в кристалле InP, на которых формируются прерывистые треки, и линейные размеры дефектов. Эти данные хорошо соответствуют экспериментальным результатам.

Радиусы непрерывных и прерывистых треков определены на основе плазменного приближения, которое предполагает, что область трека представляет собой двухкомпонентную плазму вместо обычно рассматриваемого нагретого твердого тела. Результаты расчетов показывают, что хотя только несколько процентов быстрых электронов уходит из области формируемого трека, тем не менее они уносят почти половину энергии, выделенной ионом в электронную подсистему мишени. При этом скорость передачи энергии от электронной подсистемы к атомной значительно выше, чем ранее предсказывавшаяся в рамках модели термического пика [3, 12–14], основанной на представлении электрон-фоонных взаимодействий. Это является причиной того, что даже половины выделенной ионом энергии достаточно для создания изменений в решетке, которые приводят к формированию трека в полупроводниковых или металлических материалах.

Авторы выражают благодарность В. Вешу (W. Wesch), А. Ю. Дидыку, П. Зигмунду (P. Sigmund), Ю. Н. Явлинскому, В. А. Скуратову, Л. Чаддертону (L. Chadderton), П. И. Гайдуку и А. Ф. Комарову за полезные дискуссии и замечания на стадии подготовки статьи.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Proc. 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Swift Heavy Ions in Matter, Caen, 1995. In: Nucl. Instr. Meth. B **107** (1996).
2. Ф. Ф. Комаров, А. Ф. Комаров, *Физические процессы при ионной имплантации твердых тел*, Технопринт, Минск (2001).
3. S. Furuno, H. Otsu, K. Hojou, and K. Izui, Nucl. Instr. Meth. B **107**, 223 (1996).
4. O. Herre, W. Wesch, E. Wendler et al., Phys. Rev. B **58**, 4832 (1998).
5. E. Dartyge and P. Sigmund, Phys. Rev. B **32**, 5429 (1985).
6. F. Studer, M. Hervieu, J.-M. Costantini, and M. Toulemonde, Nucl. Instr. Meth. B **122**, 449 (1997).
7. P. I. Gaiduk, F. F. Komarov, and W. Wesch, Nucl. Instr. Meth. B **164/165**, 377 (2000).
8. D. P. Ertchak, V. G. Efimov, and V. F. Stelmakh, J. Appl. Spectr. **64**, 433 (1997).
9. T. A. Tombrello, C. R. Wie, M. Itoh, and T. Nakayama, Phys. Lett. A **100**, 42 (1984).
10. В. А. Белый, Ф. Ф. Комаров, ЖТФ **68**, 42 (1998).
11. Ф. Ф. Комаров, А. Ф. Комаров, ЖЭТФ **113**, 1 (1998).
12. И. М. Лифшиц, М. И. Качанов, Л. В. Тантаров, Атомная энергия **6**, 391 (1959).
13. А. И. Глушцов, Ф. Ф. Комаров, А. П. Новиков и др., ДАН ВССР **31**, 609 (1987).
14. M. Toulemonde, E. Paumier, and Ch. Dufour, Radiat. Effects and Defects in Solids **126**, 201 (1993).
15. Yu. V. Martynenko and Yu. N. Yavlinskii, Atom. Energ. **62**, 80 (1987).
16. A. E. Volkov and V. A. Borodin, Nucl. Instr. Meth. B **107**, 172 (1996).
17. M. Toulemonde, Ch. Dufour, A. Meftah, and E. Paumier, Nucl. Instr. Meth. B **166/167**, 903 (2000).
18. А. Ю. Дидык, В. К. Семина, А. Халил и др., Письма в ЖТФ **26**, 1 (2000).
19. Yu. Yavlinskii, Nucl. Instr. Meth. B **146**, 142 (1998).
20. Н. Бор, *Прохождение атомных частиц через вещество*, Изд-во иностр. лит., Москва (1950).
21. M. A. Kumakhov and F. F. Komarov, *Energy Loss and Ranges of Ions in Solids*, Gordon and Breach, New York–London–Paris (1981).
22. H. Betz, Rev. Mod. Phys. **44**, 465 (1972).
23. F. Martin, Phys. Rev. Lett. **22**, 329 (1969).
24. C. Moak, Phys. Rev. B **10**, 2681 (1974).
25. Sh. Datz, Radiat. Effects **12**, 163 (1972).

- 
26. И. С. Дмитриев, В. С. Николаев, ЖЭТФ **47**, 615 (1964).
27. A. F. Burenkov, F. F. Komarov, and S. A. Fedotov, Nucl. Instr. Meth. B **67**, 35 (1992).
28. P. I. Gaiduk, F. F. Komarov, V. S. Tishkov et al., Phys. Rev. B **61**, 15785 (2000).
29. A. F. Burenkov, F. F. Komarov, and S. A. Fedotov, Phys. Stat. Sol. B **169**, 33 (1992).
30. A. F. Burenkov, F. F. Komarov, and S. A. Fedotov, Nucl. Instr. Meth. B **67**, 30 (1992).
31. J. F. Ziegler, J. P. Biersack, and C. U. Littmark, *The Stopping and Range of Ions in Solids*, Pergamon Press, New York (1985).
32. N. Bohr, Phil. Mag. **30**, 681 (1915).