

Б. Я. ЮРКОВ

ТЕОРИЯ КАСКАДА ПРИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЯХ ПЕРВИЧНОГО СМЕЩАЕМОГО АТОМА

Теория каскада, учитывающая многочастичный характер взаимодействия атомов через приближение непрерывной потери энергии, распространяется на область больших энергий. Для поперечного сечения упругого соударения вводится обобщенная формула, совпадающая с формулой Резерфорда при больших энергиях. Вычисления находятся в согласии с машинными расчетами при моделировании каскада.

В предыдущей работе по теории каскада [1] начальная энергия первичного смещаемого атома W ограничивалась 1,5 кэВ. Такой случай редко встречается на практике. При облучении электронами с энергией $E_0 \sim 1$ МэВ каскад практически не развивается, а при облучении, например, кремния протонами с энергией $E_0 = 6,3$ МэВ первичный смещаемый атом может получить максимальную энергию $W_0 = 840$ кэВ, далеко выходящую из рассмотренного интервала.

Однако каскадная теория Линдхарда и др. [2], претендующая на рассмотрение всего интервала энергий W , позволяет определять не число смещенных атомов в каскаде, приводящих к радиационным дефектам («каскадную функцию»), а только среднюю безразмерную энергию \bar{v}_L , расходуемую в процессе каскада смещений на все упругие соударения (в том числе и не приводящие к развитию каскада). Для определения числа соударений, производящих радиационные дефекты, величину \bar{v}_L нужно разделить на некоторый коэффициент, значение которого в [2] не определено.

В то же время применявшийся ранее метод расчета [1] нельзя формально распространить на область больших энергий. Во-первых, используемая там формула для поперечного сечения справедлива только до граничной энергии [3]

$$W_{\zeta} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{a} \cdot \frac{M_1 + M_2}{M_2},$$

где M_1 и M_2 — массы сталкивающихся атомов, $Z_1 e$ и $Z_2 e$ — заряды их ядер,

$$a = 0,8853 a_0 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}$$

(a_0 — радиус первой боровской орбиты). Для случая соударения атомов кремния ($Z_1=Z_2=14$) $W_\zeta=40$ кэВ. Выше этой энергии ($W>W_\zeta$) упругое соударение атомов должно рассчитываться по формуле Резерфорда. Во-вторых, в потерях энергии движущимся атомом следует учитывать вклад ионизационных потерь [4], которые при высоких энергиях W являются даже преобладающими. Поэтому для расчета каскада необходимо иметь формулы, справедливые как для малых, так и для больших энергий W .

Что касается поперечного сечения, то предлагаемое в [2] универсальное выражение неудобно для наших целей из-за его неаналитичности. Можно, однако, написать приближенную аналитическую зависимость, исходя из того, что при малых энергиях ($W<W_\zeta$) имеет место зависимость Линдхарда и Шарффа [5], а при больших энергиях ($W>W_\zeta$) поперечное сечение представляется формулой Резерфорда.

Введем используемые в [2] безразмерные величины

$$\varepsilon = \frac{W_1}{W_\zeta}, \quad (1)$$

где

$$W_1 = \frac{M_1 v^2}{2},$$

и

$$t = \varepsilon^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}. \quad (2)$$

Первая из этих величин представляет собой известный параметр Бора [6]

$$\zeta = \frac{a}{b},$$

где

$$b = \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{\mu v^2}, \quad \mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}.$$

Здесь b — расстояние наибольшего сближения соударяющихся атомов, а v — скорость их сближения.

В формуле (2) θ обозначает угол рассеяния в системе координат, движущейся вместе с центром масс. Если воспользоваться связью этого угла θ с энергиями соударяющихся частиц [7]

$$\frac{W_2}{W_1} = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \sin^2 \frac{\theta}{2},$$

то вторую безразмерную величину можно записать, как

$$t = \frac{(M_1 + M_2)^2}{4M_1 M_2} \frac{W_1 W_2}{W_\zeta^2}.$$

С помощью (1) и (2) поперечные сечения Линдхарда — Шарффа и Резерфорда запишутся соответственно

$$d\sigma_{LS} = \xi_v \left(\frac{\pi a}{4} \right)^2 \frac{dt}{t^{3/2}},$$

$$d\sigma_R = \frac{\pi a^2}{4} \frac{dt}{t^2}.$$

Теперь не представляет большого труда составить обобщенную формулу

$$d\sigma = \frac{\pi a^2}{4} \frac{dt}{t^2 (1 + t^{-1/2})}, \quad (3)$$

которая в размерных единицах будет иметь вид

$$d\sigma = \frac{1}{4} \left(\frac{b}{2} \right)^2 \left(1 + \frac{b}{a \sin \frac{\theta}{2}} \right)^{-1} \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (3')$$

или

$$d\sigma = \pi a^2 \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \frac{W_\xi^2}{W_1 W_2} \left\{ 1 + \left[\frac{4 M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \frac{W_\xi^2}{W_1 W_2} \right]^{1/2} \right\}^{-1} dW_2. \quad (3'')$$

При

$$b \ll a \sin \frac{\theta}{2}$$

формула (3') точно совпадает с формулой Резерфорда. Для одинаковых взаимодействующих атомов при малых энергиях формула (3'') только множителем $2/\pi \cdot 0,8853 \cdot 2,7183 \approx 1,5$ будет отличаться от формулы Линдхарда и Шарффа.

Что касается потерь энергии движущимся атомом, то, как известно из эксперимента [8], при больших энергиях они определяются суммой ионизационных потерь, которые можно рассчитывать по соответствующим формулам Линдхарда и Шарффа [5], и потерь энергии на упругие соударения. При $W > W_\xi$ упругие потери определяются резерфордовским сечением, умноженным на энергию отдачи W_2 и проинтегрированным от некоторой минимальной энергии [7]:

$$W_{\min} = \frac{4a_0^2 (Ry)^2 Z^4}{W_1 a^2} \quad (Z_1 = Z_2)$$

(Ry — постоянная Ридберга в эВ) до энергии движущегося атома W_1 . Выражая W_{\min} через граничную энергию W_ξ , получаем для суммы тормозных способностей (одинаковых атомов) следующее выражение:

$$\left(\frac{dW_1}{d\rho} \right) = r_0 \frac{N}{A} 4\pi a_0^2 (Ry)^2 Z^4 f(W_1), \quad (4)$$

где

$$f(W) = 2 \left[\frac{1}{W} \ln \frac{2W}{W_\xi} + \frac{\xi_e}{\sqrt{2}} \frac{1}{Ry Z^3} \left(\frac{m}{M} \right)^{1/2} \left(\frac{W_\xi}{Ry} \right)^{1/2} \right]$$

имеет зависимость, представленную для кремния на рис. 1. Здесь $\rho = r/r_0$ — приведенный остаточный пробег, выраженный в единицах r_0 ; причем r_0 — полный криволинейный пробег, который имеет атом вещества, получивший максимальную энергию отдачи W_0 от проникающего протона с начальной энергией пучка E_0 ; N — число Авогадро; A — атомный вес, г/моль; m — масса электрона; ξ_e — коэффициент Линдхарда и Шарффа [5] в формуле для ионизационных потерь энергии.

Для суммы тормозных способностей (4) можно получить более точное выражение $f(W)$ (в области $W \sim W_\xi$), если вместо поперечного сечения Резерфорда $d\sigma_R$ использовать обобщенную формулу (3''). В этом случае сумма тормозных способностей (4) должна была бы описывать процесс потери энергии движущимся атомом на всем ин-

тервале энергии W . Однако, как мы уже знаем, при малых энергиях ($W < W_{\xi}$) имеется расхождение между обобщенной формулой поперечного сечения (3) и формулой Линдхарда и Шарффа. И эта разница приведет к накапливанию ошибок при суммировании по всем поколениям каскада. Этого можно избежать, если при $W = W_{\xi}$ проводить «сшивание» самого процесса развития каскада. Дело в том, что иско-

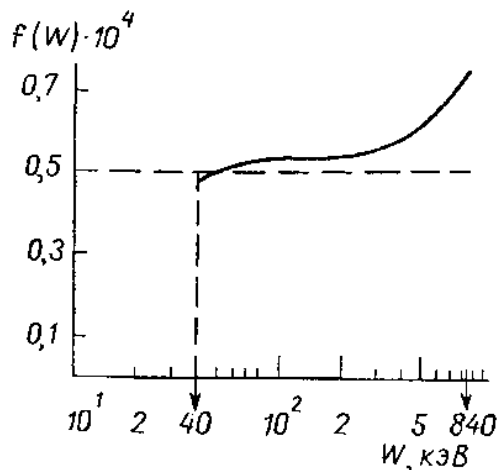


Рис. 1. Переменная часть суммы тормозных способностей

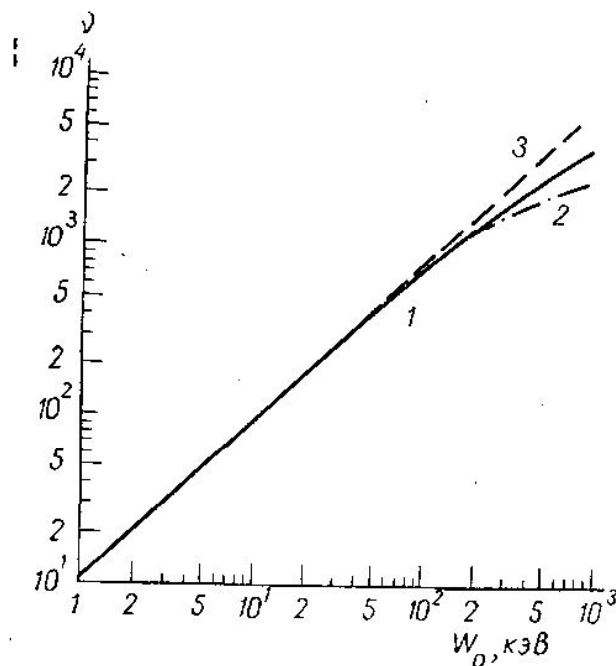


Рис. 2. Зависимость ν (W_0): 1 — согласно формуле (8), 2 — согласно [2] с учетом переходного множителя, 3 — согласно аппроксимации $\nu(W_0) = 11,4W_0^{0,905}$ (кэВ)

мое распределение атомов m -го поколения и при высоких энергиях W_m будет определяться прежней зависимостью (формула (6) [1]):

$$I_m(W_m) = 2 \int_{W_m}^{W_0} I_{m-1}(2\chi) \left\{ \int_{W_m}^{\chi} \left[\frac{dS(2\chi, W'_m)}{dW'_m} \right] \left(\frac{dW'_m}{d\rho_m} \right)^{-1} dW'_m \right\} d\chi, \quad (5)$$

где «сшиванию» подлежат не отдельные зависимости упругого рассеяния и тормозной способности, а их отношение, равное на основании (3'') и (4)

$$\left[\frac{dS(2\chi, W)}{dW} \right] \left(\frac{dW}{d\rho} \right)^{-1} = \frac{1}{f(W)} \frac{1}{2\chi W^2} \left[1 + \frac{W_{\xi}}{(2\chi W)^{1/2}} \right]^{-1}. \quad (6)$$

В интервале от пороговой энергии образования устойчивого радиационного дефекта (в кремнии) $W_l = 15,8$ эВ [9] и до $W \approx W_{\xi}$ согласно формулам, использовавшимся в предыдущей работе [1], имеем

$$\left[\frac{dS(2\chi, W)}{dW} \right] \left(\frac{dW}{d\rho} \right)^{-1} = \frac{1}{2} \frac{1}{(2\chi)^{1/2} W^{3/2}}.$$

С другой стороны, экстраполяция выражения (6) в область малых энергий приводит к виду

$$\left[\frac{dS(2\chi, W)}{dW} \right] \left(\frac{dW}{d\rho} \right)^{-1} \cong \frac{1}{W_\xi f(W)} \frac{1}{(2\chi)^{1/2} W^{3/2}}.$$

Поскольку, как видно на рис. 1, при $W \sim W_\xi$ произведение $W_\xi f(W) \approx 2$, то, полагая в (6)

$$f(W) = \frac{2}{W_\xi},$$

мы добьемся «сшивания» областей малых ($W < W_\xi$) и больших ($W > W_\xi$) энергий. С учетом вышесказанного внутренний интеграл в (5) будет равен

$$\begin{aligned} \frac{W_\xi}{2} (2\chi) \int_{W_m}^x \left[1 + \frac{W_\xi}{(2\chi W_m')^{1/2}} \right]^{-1} \frac{dW_m'}{(2\chi W_m')^2} = \\ = \frac{1}{W_\xi} [\ln(1+u) - (1+u)] \Bigg|_{\frac{W_\xi}{(2\chi W_m')^{1/2}}}^{\frac{W_\xi}{(2\chi^2)^{1/2}}} \end{aligned}$$

Введем безразмерные величины

$$x = \frac{W_0}{2^{m-1}} \frac{1}{\chi}, \quad z = \frac{W_0}{2^{m-1}} \frac{1}{W_m}, \quad \frac{1}{c} = \frac{W_0}{2^{m-1}} \frac{\sqrt{2}}{W_\xi};$$

тогда выражение (5) можно будет записать в таком виде:

$$\begin{aligned} I_m(z) = \frac{\sqrt{2}}{c} \int_1^z I_{m-1}(x) [\ln(1+cx) - (1+cx) - \\ - \ln(1+cx^{1/2}z^{1/2}) + (1+cx^{1/2}z^{1/2})] \frac{dx}{x^2}. \end{aligned} \quad (7)$$

Легко проверить, что выражение, стоящее в квадратной скобке под знаком интеграла, при $c \rightarrow \infty$ совпадает с прежним выражением [1]:

$$I_m(z) = \sqrt{2} \int_1^z I_{m-1}(x) \left(\sqrt{\frac{z}{x}} - 1 \right) \frac{dx}{x}.$$

Число радиационных дефектов, равное числу смещенных атомов с пороговой энергией $W_m = W_l$, просуммированное по всем поколениям m , равно

$$v = \sum_1^m I_m(z_l), \quad z_l = \frac{W_0}{2^{m-1}} \frac{1}{W_l}. \quad (8)$$

Результаты расчета представлены на рис. 2 (см. Приложение). Как видно из этого рисунка, кроме самых больших энергий W_0 полученная кривая хорошо аппроксимируется зависимостью

$$v(W_0) = 11,4 W_0 (\text{кэВ})^{0,905} = 0,0221 W_0 (\text{эВ})^{0,905}.$$

Полученные результаты не противоречат исследованиям по моделированию каскада методом Виньярда, проведенным в [10]. Так,

авторы приводят рисунки с обозначениями внедренных атомов и (равных им по числу) вакансий, образованных в результате развития каскада в кремнии при начальной энергии первичного смещаемого атома $W_0 = 10$ кэВ. Как можно заключить из этих рисунков, число смещений (≈ 80) весьма близко к значению ν на кривой рис. 2.

Для нашего случая ($Z=14$, $A=28,08$ г/моль) коэффициент пропорциональности

$$k = 0,133Z^{2/3}A^{-1/2},$$

используемый в [2], равен $\approx 0,15$. Если ввести такое соотношение

$$\nu = \frac{\bar{\nu}_L}{1,7 \cdot 10^{-3}},$$

то соответствующая данному коэффициенту кривая для величины $\bar{\nu}_L$ [2] совпадает с полученной нами зависимостью всюду, кроме самых больших энергий (600–840 кэВ) (рис. 2). Расхождение можно объяснить тем, что при столь высоких энергиях величина $f(W)$ уже не является постоянной (см. рис. 1).

В заключение автор выражает благодарность Ю. В. Булгакову и М. А. Кумахову за полезные критические замечания, а также Н. Н. Казаковой и Н. Е. Курочкину за помощь в вычислениях.

Приложение

Для экономии времени применялась стандартная программа вычисления определенного интеграла с автоматическим выбором шага, разработанная ВЦ МГУ. Счет $I_m(Z)$ производился с помощью $(m-2)$ -го рекурсивного обращения в процедуре вычисления интеграла P 0655 ($X, Y, IN [1], P, Q$), где X — значение аргумента, Y — переменная, значениями которой являются вычисленные значения подынтегральной функции, $IN [1]$ — первое из 4-х значений массива, обозначающее нижний предел интегрирования (три остальных: значение верхнего предела интегрирования, начальный шаг и абсолютная точность вычисления интеграла), P и Q — метки.

В качестве примера приведем реальную программу, которая использовалась для вычисления $I_4(Z)$ для двенадцати значений начальной энергии W_0 .

```
begin integer j; real wl, wzita; array w0[1:12];
  p0042(wl, wzita, w0);
  for j:=1 step 1 until 12 do
    begin real a, x1, x2, x3, y1, y2, y3, z, i, k1, k2;
      array in[1:4], i1[1:4], i2[1:4];
      a:=2↑(4-1)/sqrt(2)×wzita/w0[j];
      z:=w0[j]/2↑(4-1)/wl;
      if z≤1 then goto s1 else
      in[1]:=1; in[2]:=z; in[3]:=0.5; in[4]:=10-1;
      i:=p0655(x1, y1, in[1], p1, q1);
      goto s;
      p1:i1[1]:=1; i1[2]:=x1; i1[3]:=0.5; i1[4]:=10-1;
      k1:=p0655(x2, y2, i1[1], p2, q2);
      goto s2;
      p2:i2[1]:=1; i2[2]:=x2;
```

```

12[3] := .5; 12[4] := 10 - 1;
k2 := p0655 (x3, y3, 12[1], p3, q3);
goto s3;
p3 : y3 := sqrt(2)/a/x3 ↑ 2 × (ln(1 + a × x3) — ln(1 +
a × sqrt(x3 × x2)) — (1 + a × x3) + (1 + a ×
sqrt(x3 × x2)));
q3 : x3 := x3;
s3 : y2 := k2 × sqrt(2)/a/x2 ↑ 2 × (ln(1 + a × x2) — ln(1 + a ×
sqrt(x2 × x1)) — (1 + a × x2) + (1 + a × sqrt(x2 × x1)));
q2 : x2 := x2;
s2 : y1 := k1 × sqrt(2)/a/x1 ↑ 2 × (ln(1 + a × x1) — ln(1 + a × sqrt
(x1 × z)) — (1 + a × x1) + (1 + a × sqrt(x1 × z)));
q1 : x1 := x1;
s : p1041 (j, w0 [j], z, i);
s1 : end;
stop end

```

До энергий $W_0 \approx W_\xi$ счет ограничивался пятым поколением ($m=5$), а выше W_ξ — достаточно было учитывать вклад шестого или седьмого поколения. Время счета резко возрастало с увеличением m . Так, при $m=7$ для счета (на БЭСМ-4) двух последних точек ($W_0=600$ кэВ и 840 кэВ) с необходимой точностью требовалось около двух часов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Юрков Б. Я. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., 15, № 6, 704, 1974.
2. Lindhard J. Nielsen V. Scharff M. Thomsen P. V. «Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.», 33, No. 10, 1963.
3. Динс Дж., Виньярд Дж. Радиационные эффекты в твердых телах. М., 1960.
4. Кумахов М. А. «Phys. Lett.», 29A, 243, 1969.
5. Lindhard J., Scharff M. «Phys. Rev.», 124, 128, 1961.
6. Бор Н. Прохождение атомных частиц через вещество. М., 1950.
7. Томпсон М. Дефекты и радиационные повреждения в металлах. М., 1971.
8. Sattler A. R. «Phys. Rev.», 138, 1815, 1965.
9. Flicker H., Loferski J. J., Scott-Monck J. «Phys. Rev.», 128, 2557, 1962.
10. Ленченко В. М., Акилов Ю. З. «Физика и техника полупроводников», 5, 397, 1971.

Поступила в редакцию
28.12 1973 г.

НИИЯФ