

52-я Международная Тулиновская конференция по Физике Взаимодействия Заряженных Частиц с Кристаллами

Москва. МГУ им М.В.Ломоносова. 30 мая – 1 июня 2023 г

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ОКОЛО ТРЕКА БЫСТРОГО ИОНА В КРЕМНИИ

Н.В. Новиков*, Н.Г. Чеченин, А.А. Широкова

НИИЯФ МГУ

31 мая 2023 г

*e-mail: nvnovikov65@mail.ru

1. 1 Процессы вблизи трека иона

Исследование процессов вблизи трека иона

распределение вторичных частиц (eh, дефекты);

размер трека;

структурно-фазовые модификации материала.

Актуальность

Моделирование сбоев электроники (eh-пары, $\langle q \rangle$)

Материаловедение

распределение дефектов, рельеф,

нагрев, аморфизация

Технология (поры в мембранах, детекторы).

1.1 Этапы по времени для процессов вблизи трека

1. Прохождение первичного иона ($t < 0.1$ пс)

Образование электрон - дырочных пар $S_e(E) > S_n(E)$;

Начало атомных каскадов $S_e(E) < S_n(E)$.

2. Релаксация возбуждения ($t = 1 - 10$ пс)

Теплообмен электронной T_e и ионной T подсистем;

Накопление дефектов, аморфизация.

3. Эволюция к равновесию ($t > 100$ пс)

Выравнивание температур,

Миграция и рекомбинация части дефектов.

1.2 Теоретические модели

1. *Линейная передача энергии (ЛПЭ)* $\langle q(x) \rangle$

максимальное количества $e\hbar$ - пар.

$$L(E,Z,A)[\text{МэВ см}^2/\text{мг}] = 0.0431 S_e(E,Z,A) [\text{эВ/А}]$$

2. *Модель термического пика* $T(t,r,x)$

система термодинамических уравнений

T_e, T – температуры электронов и ионов;

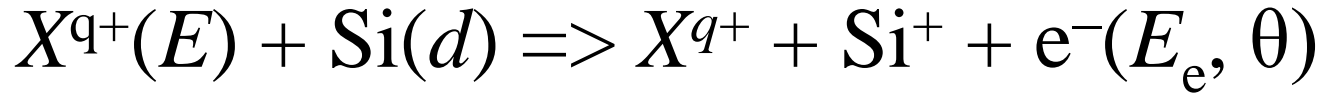
C_e, K – удельные теплоемкости материала;

$C(T), K(T)$ – теплопроводности.

(3) *Экситон* – квазичастица, возбуждение

конденсированного вещества в виде связанного состояния электрона и однозарядного кластера.

1.3 В этой работе исследуется процесс



^{24}Mg ; $E=0.1 - 10$ МэВ/нуклон,
 $d \sim 100$ А, $E_e \leq 5$ кэВ, $\theta = 0 - 180^\circ$

Угол падения $\alpha=0$.

(Одно выделенное направление \Rightarrow аксиальная симметрия)

Цель: Распределение электронов $n(x,r,t)$

2. Количество электронов

Количество ионизационных столкновений :

$$v(Z, E) / \Delta x = \rho \sigma(Z, E) \quad \sigma \gg \sigma_{2e}$$

$$\sigma(Z, E) = q^2 (Z, E) \sigma(Z = 1, E), \quad q - \text{заряд иона}$$

ЛПЭ приближение:

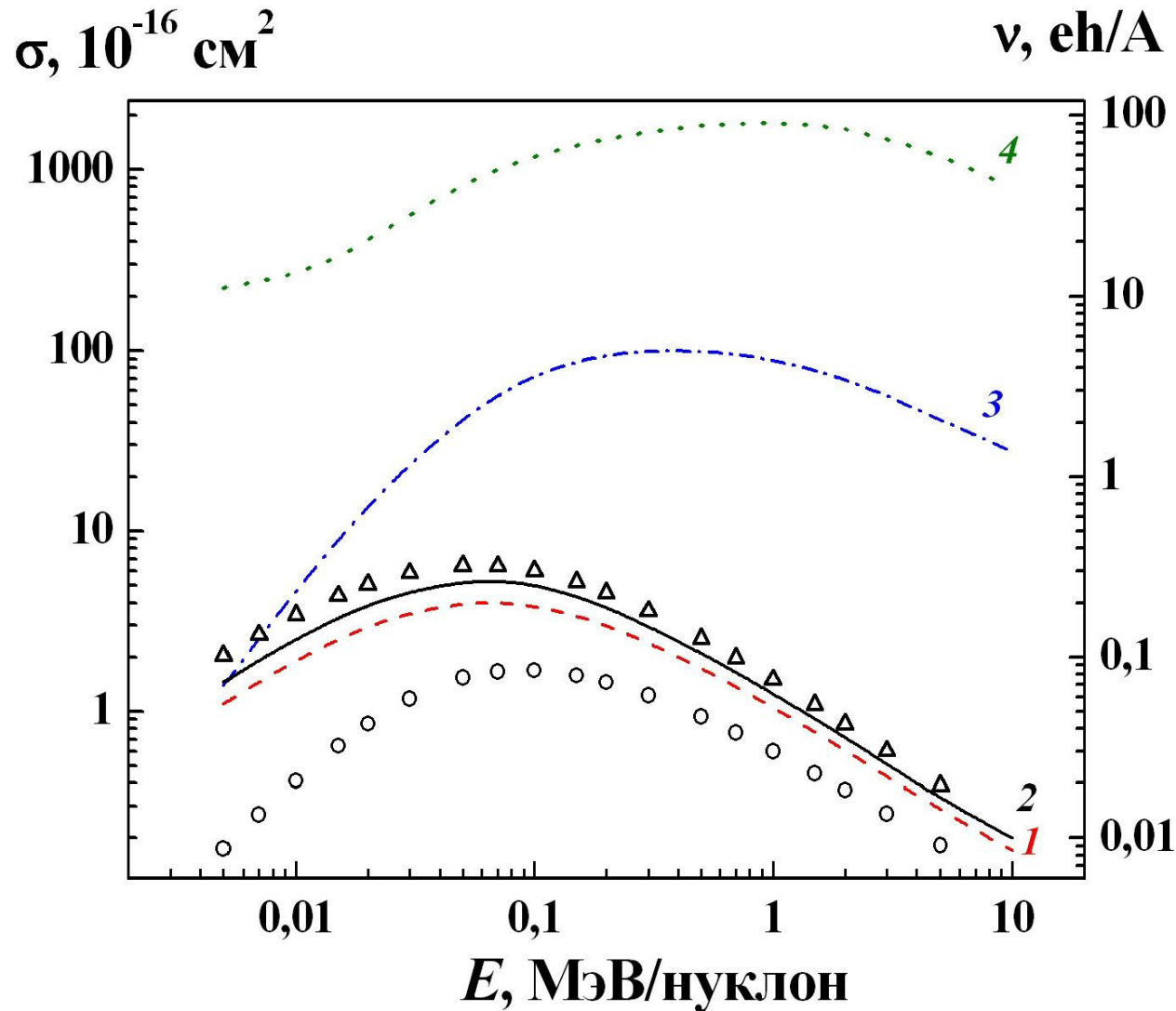
Для быстрых ионов ($S_e(E) > S_n(E)$)

$$S_e(Z, E) = \rho \sum_i \sigma_j(Z, E) \overline{E}_j \Rightarrow S_e(Z, E) \approx \rho \sigma(Z, E) [\varepsilon_0 + \overline{E}_e]$$

$$\overline{E}_e \rightarrow 0 \Rightarrow v_{\max}(Z, E) / \Delta x = S_e(Z, E) / \varepsilon_0$$

$$S_e [\text{эВ/А}], \Delta x [\text{А}], \varepsilon_0 = 3.6 \text{ эВ}, \rho = 5 \times 10^{22} \text{ ат/см}^3$$

2. Количество электронов



[Rudd PRA 1983]

$p\text{-Ne}$ (o) ;

$p\text{-Ar}$ (Δ).

1 – $p\text{-Si}$ (gas),

2 – $p\text{-Si}$ (solid),

3 – $^{24}\text{Mg-Si}$ (solid)

4 – $\nu_{\text{max}}(E)$

$$C_{gs} = \frac{\sigma_B(E, \varepsilon_{sol})}{\sigma_B(E, \varepsilon_{gas})} > 1$$

$$\nu_{\text{max}}/\nu > 20$$

Рис.1 Сечения ионизации атома кремния и количество электронов

$\sigma(E_{\text{max}})$, $S_e(E_{\text{max}})$: $p\text{-Si}$ $E_{\text{max}} = 55 \text{ кэВ}$; $^{24}\text{Mg-Si}$ $E_{\text{max}} = 570 \text{ кэВ/нук}$ 7/26

3. Сечение однократной ионизации

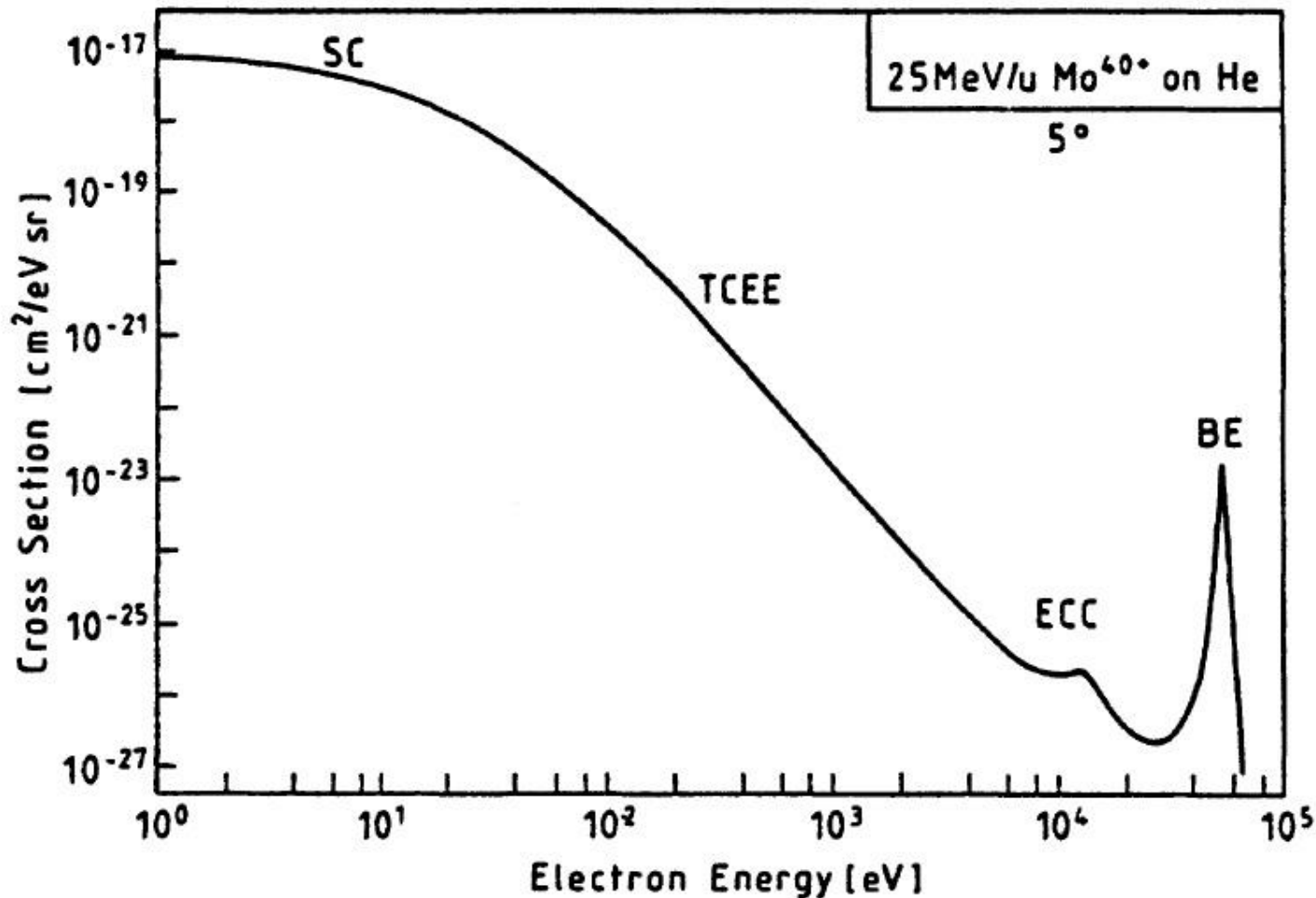


Рис.2

Stolterfoht, Dubois, Rivarola. "Electron emission in heavy ion-atom collision". Springer, 1997, 250p.

SC(soft collision); TCEE(two-center electron emission) ;
ECC(electron capture to continuum) ; BE(binary-ecounter collisions)

3. Распределение электронов по углу и энергии

Рис.3

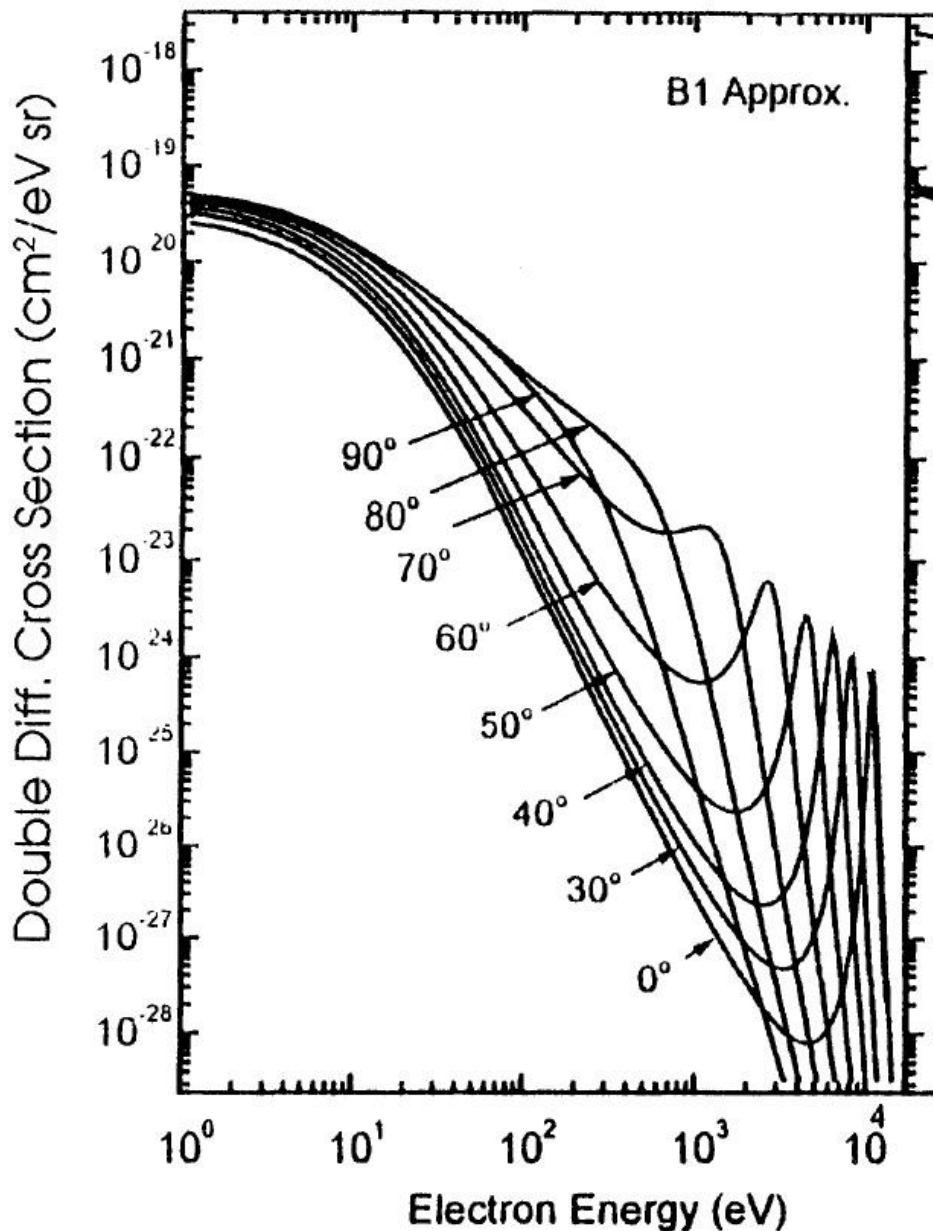


$$E = 5 \text{ МэВ}$$

N.Stolterfoht, R.D.Dubois,
R.D. Rivarola. "Electron emission
in heavy ion-atom collision".
Springer, 1997, 250p.

Борновское приближение
BE пик $E_e > 0.5 \text{ кэВ}$

$$t_{B1}(\vec{Q}, \vec{k}_e) \propto 1 / \left[\beta^2 + |\vec{Q} - \vec{k}_e|^2 \right]^2$$



3. Распределение электронов по углу и энергии

$$\sigma_B(E) = \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{E_{\max}} dE_e \sigma_B(E, E_e, \theta)$$

Вероятность вылета электрона в направлении θ с энергией E_e в Борновском приближении не зависит от массы A и заряда иона q :

$$F(E, E_e, \theta) = \frac{\sigma_B(E, E_e, \theta) \sin \theta}{\sigma_B(E)}.$$

$$f(E, \theta) = \int_0^{E_{\max}} dE_e F(E, E_e, \theta)$$

3. Распределение электронов по углу $f(E, \theta)$

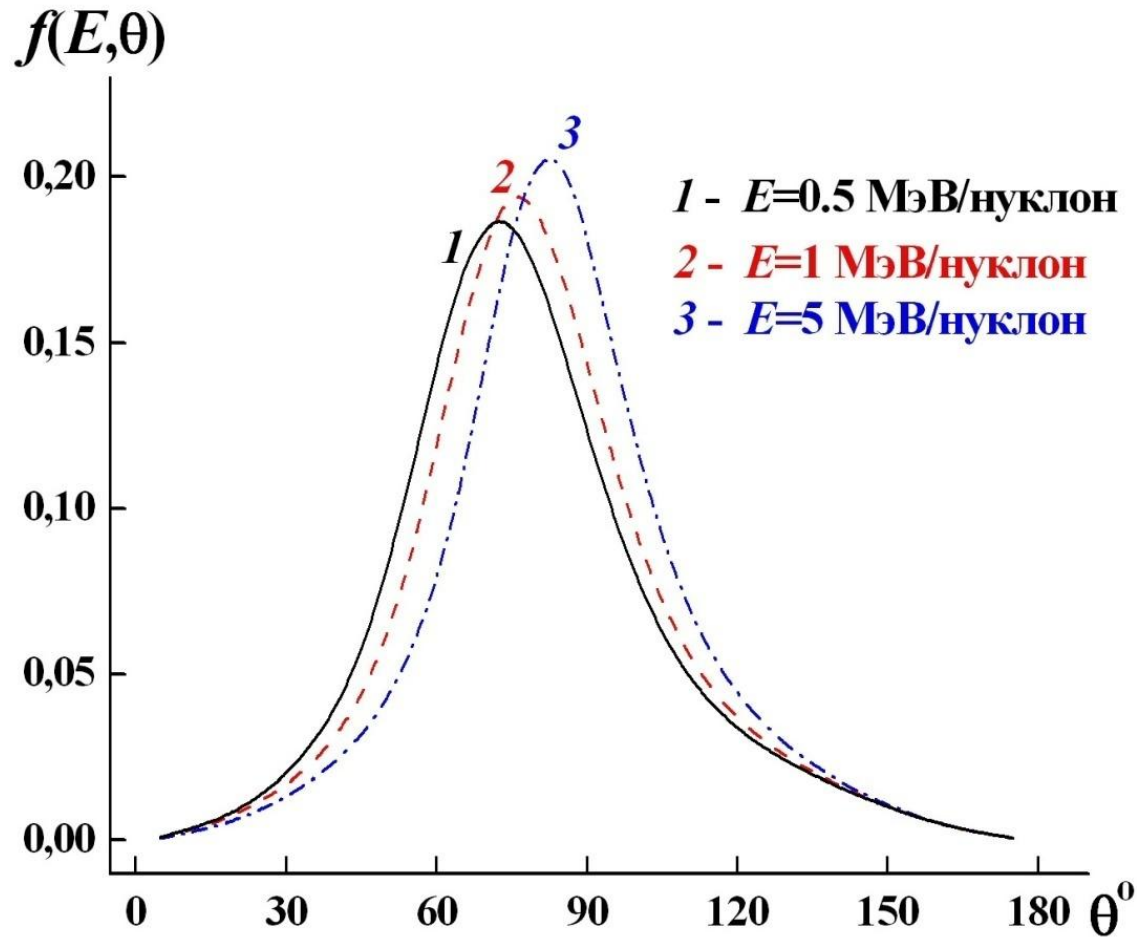


Рис.4 Распределение по углу вылета электрона

асимметрия $f(E, \theta)$ по θ : $\theta_{max} < 90^\circ$

3. Распределение электронов по энергии

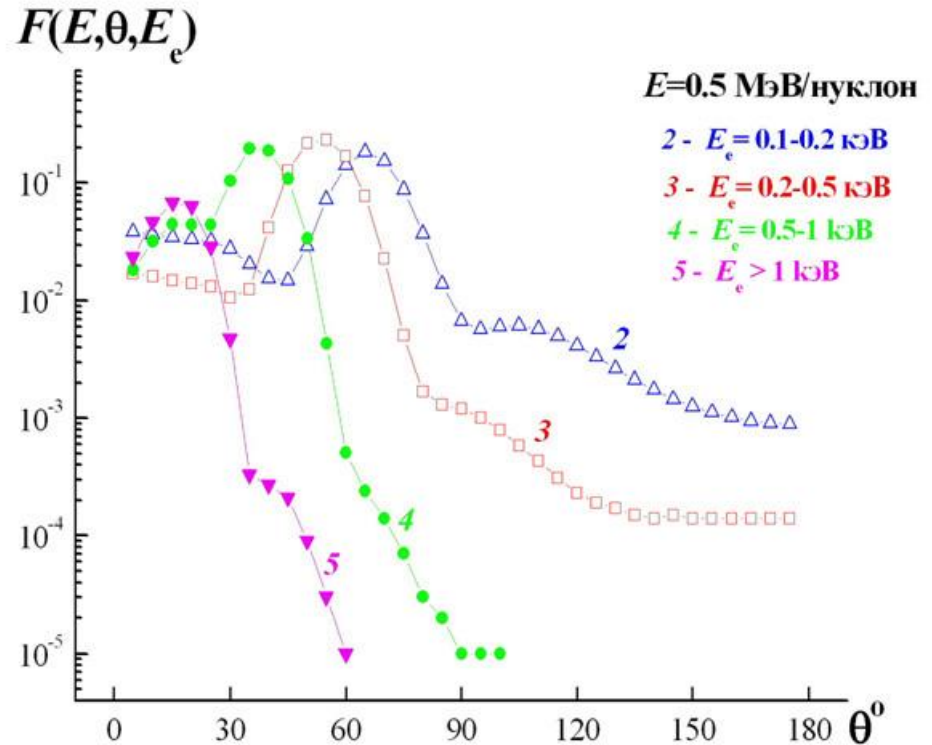
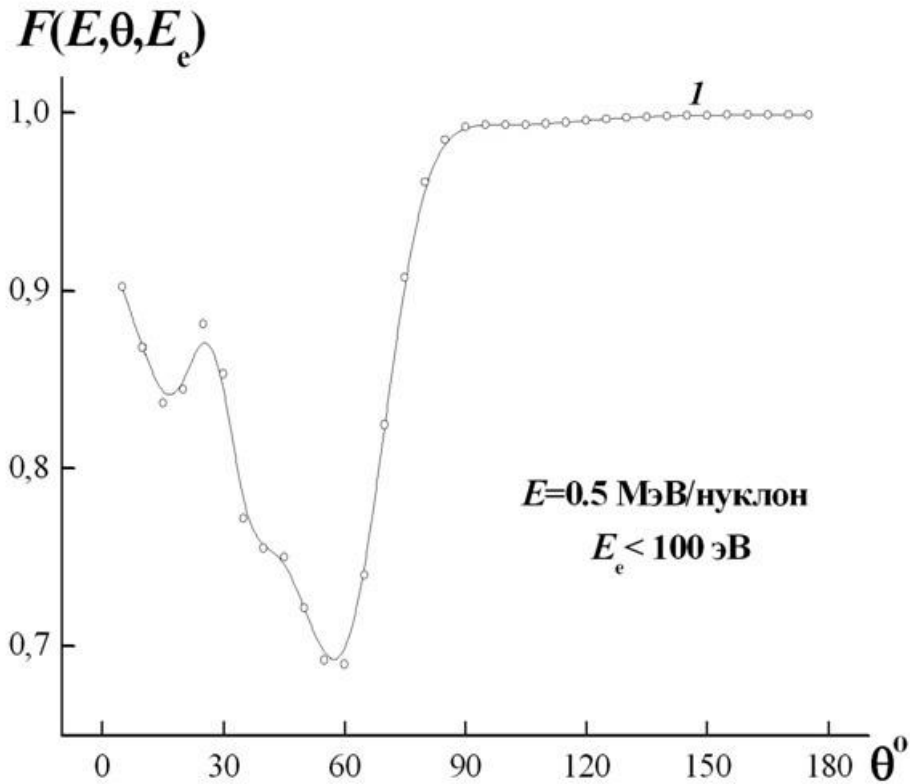


Рис.5 Распределение по углу вылета и энергии электрона

$$\theta > 90^\circ \quad E_e < 100 \text{ эВ} \quad F(E, E_e, \theta) \approx 0.98 - 0.99$$

$$\theta = 20-40^\circ \quad E_e \geq 1 \text{ кэВ} \quad F(E, E_e, \theta) \approx 0.06-0.09 \quad (f(E, \theta) \approx 0.010-0.015) \quad P_\delta \sim 0.001$$

4. Потери энергии электрона

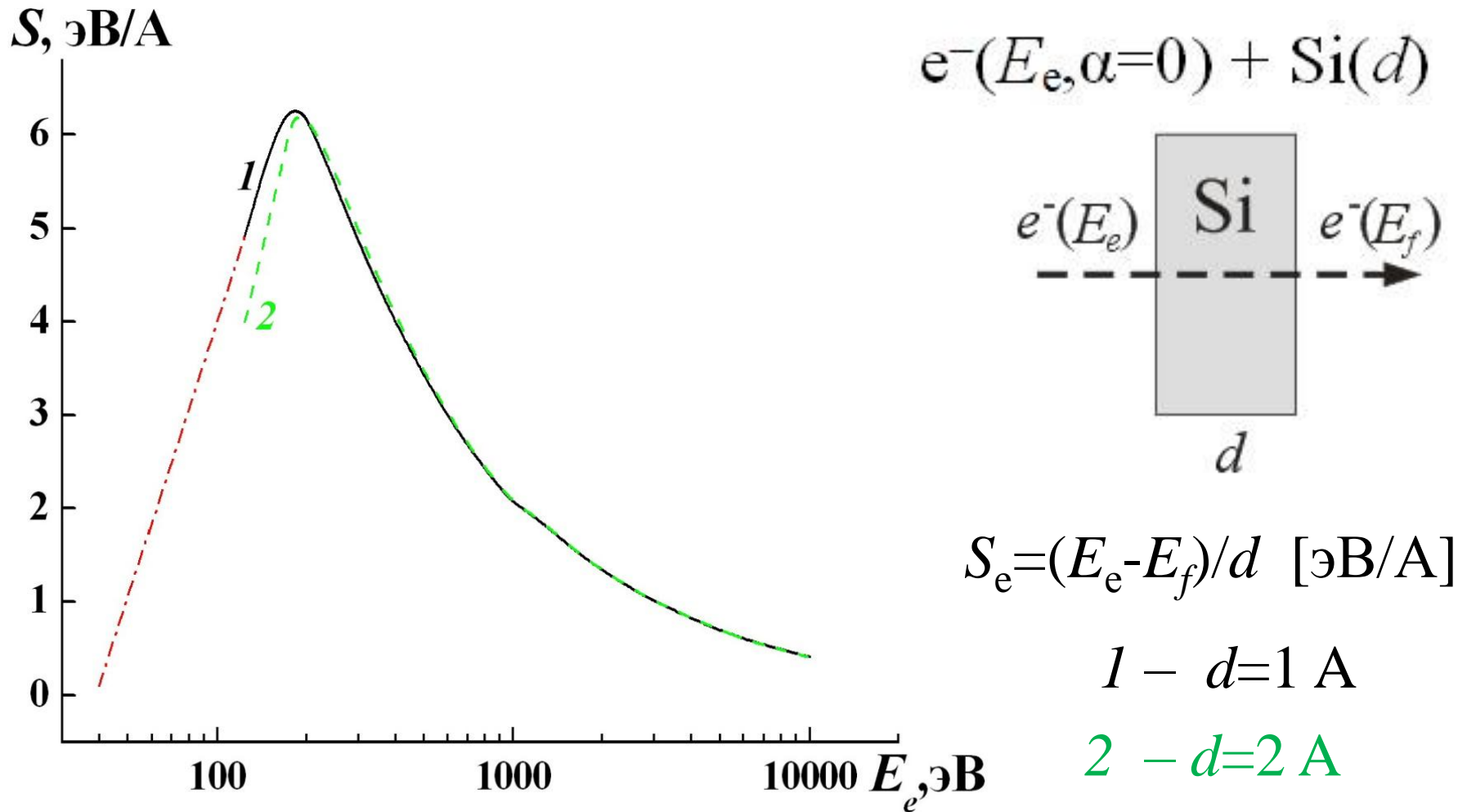


Рис.6 Потери энергии электрона $E_e \geq 120$ эВ [PENELOPE].

4. Длина трека электрона с энергией E_e

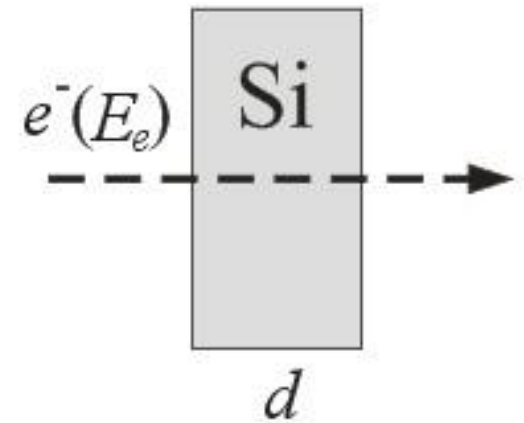
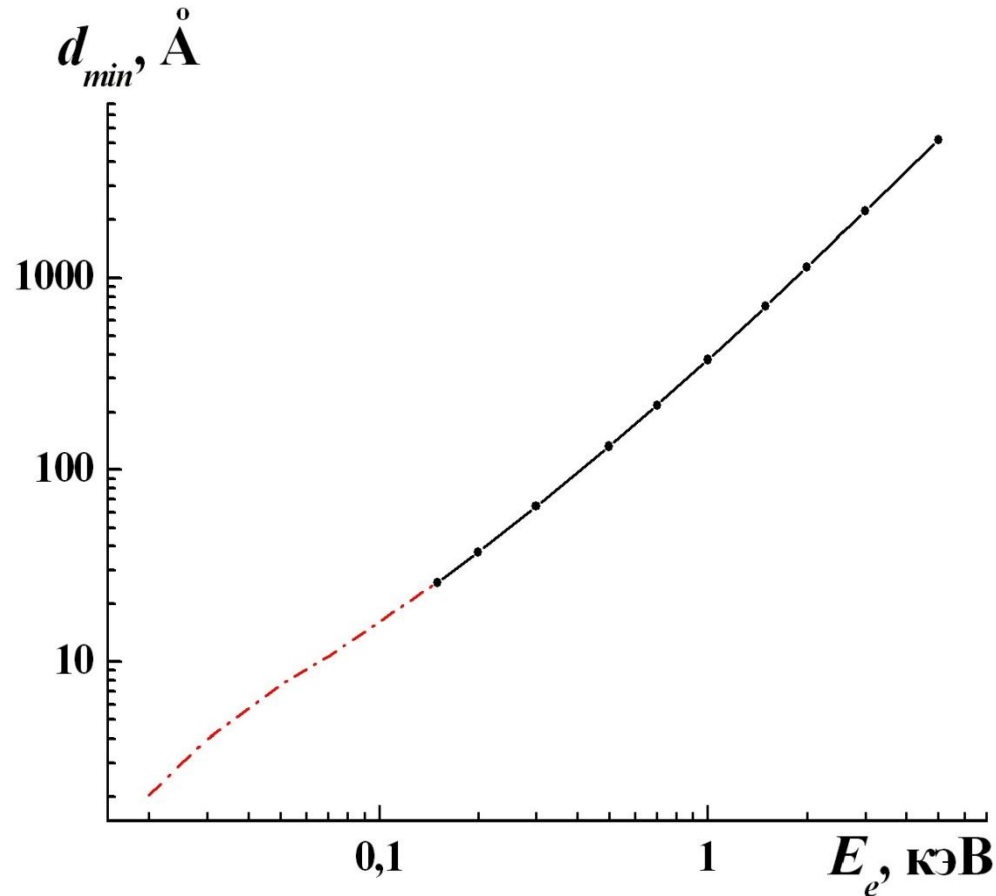
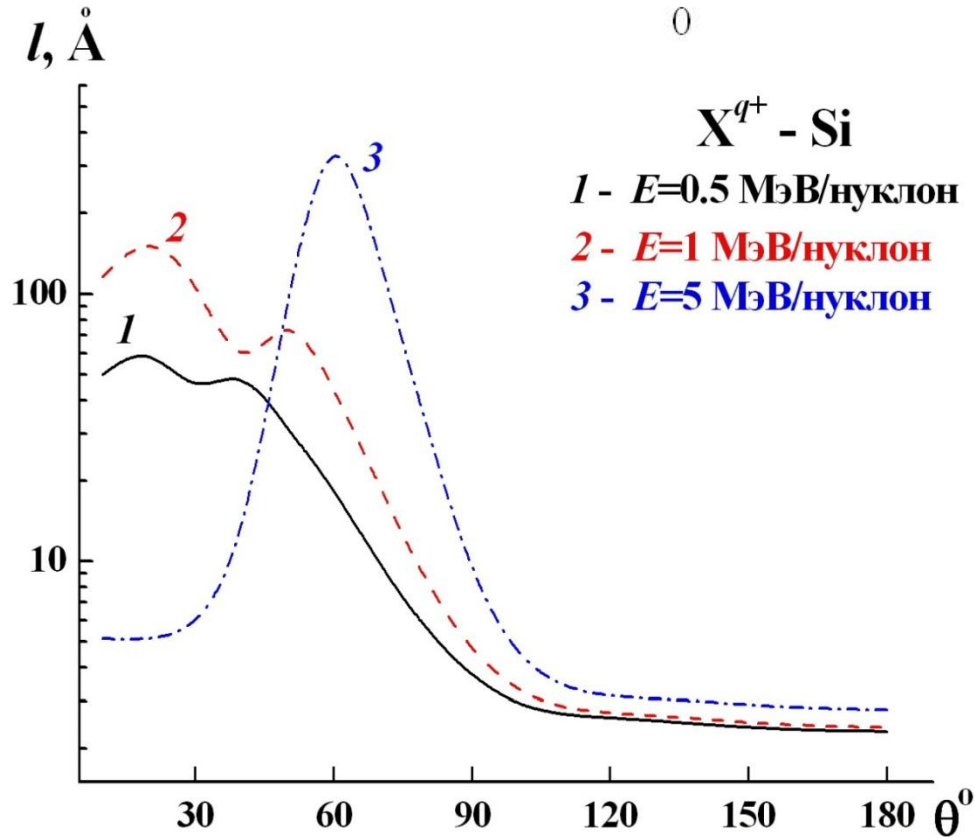


Рис.7 Минимальной толщина $d_{min}(E_e)$ при $F_{tr}(E_e) < 0.001$.

Штрих - пунктир экстраполяция

4. Средняя длина трека электрона, в ионизационном столкновении

$$l(E, \theta) = \int_0^{\infty} dE_e F(E, E_e, \theta) d_{\min}(E_e)$$



Асимметрия по l :

$$l \sim 10 - 300 \text{ \AA} \quad \theta < 90^\circ$$

$$l \sim 2 - 8 \text{ \AA} \quad \theta > 90^\circ$$

Рис.8 Длина трека электрона при замедлении до E_{\min}

5. Модель описания потоков вблизи трека

Статистическое Моделирование Траекторий (СМТ)

1. В тонкой мишени пренебрегается потерями энергии иона, $E = const$

2. Количество электронов $\nu(Z, E) d/\Delta x = const$

3. Угловое и энергетическое распределение **каждого** электрона описывается набором треков $\Delta t = \Delta x/V(E)$

$F(E, E_k, \theta_j)$ ($k=1, k_{max}; j=1, j_{max}$) - статистический вес

$$k_{max} = 20, j_{max} = 36(18) \quad \sum_{k,j} F_{k,j} = 1$$

4. Рассматривается область возле трека

цилиндр(d, r_{max}): $d=100$ А, $r_{max} \sim 30$ А; ^{24}Mg $\nu(Z, E) d < 500$

5. Модель описания потоков вблизи трека

Статистическое Моделирование Траекторий (СМТ)

5. Траектория электрона прямолинейная (внешних полей нет)

$$x(t) = x_0 + V_e(t) t \cos \theta$$

$$r(t) = r_0 + V_e(t) t \sin \theta$$

6. Изменение энергии электрона

$$E_e(t) = m V_e^2(t) / 2 = E_0 - S(E_e) [(x - x_0)^2 + (r - r_0)^2]^{1/2}$$

5. Модель описания потоков вблизи трека

Статистическое Моделирование Траекторий (СМТ)

7. Длина трека электрона $E_e(t) \geq E_{min} \quad (r \leq r_{max})$.

8. Ион остаток Si^+ не создает новых еh-пар

$$D(Z, E) = 1/v(Z, E) \quad U(r) = 2 \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{r^2 + i^2 D^2(Z, E)}}$$

$$E_{Si}(Z, E) \sim 30 \text{ эВ/нуклон} \Rightarrow \bar{q}(Z, E) \rightarrow 0$$

Захват электрона и упругие столкновения Si^0 (дефекты)

5. Модель описания потоков вблизи трека

Статистическое Моделирование Траекторий (СМТ)

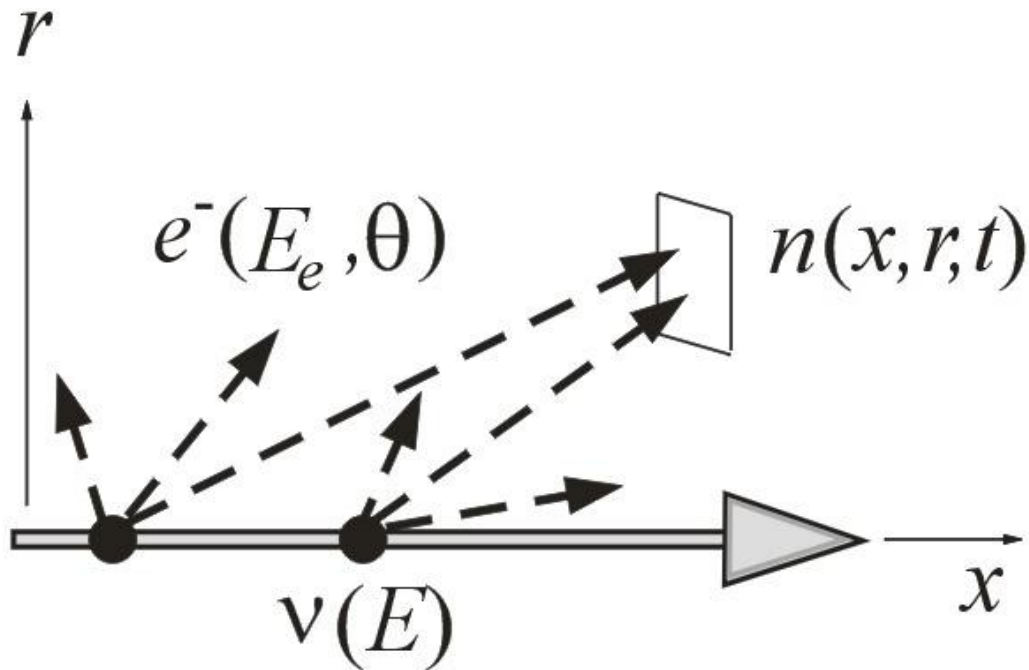


Рис.9 Модель для описания распределения количества электронов $n(x, r, t)$ вблизи трека быстрого иона

Количество треков: $k_{max} \times j_{max} \times d/\Delta x \sim 10^5$

Mg-Si($d=100$ А): $v \leq 500$, $v_\delta \approx 0.5$

5. Результат моделирования

$n(x, r, t) \Rightarrow$ выборка определенных событий:

$$n(x, r, t) < 0 \text{ при } \theta > 90^\circ$$

1. Количество электронов, пролетающих через поверхность на глубине x .

$$n_r(X, t) = \int_0^{r_{\max}} dr n(X, r, t)$$

2. Асимптотическое распределение e \bar{h} - пар

$$n(x, r, t) \rightarrow N(x, r) \text{ при } t \rightarrow \infty$$

$$N_x(r) = \int_0^d dx N(x, r) \quad N_r(x) = \int_0^\infty dr N(x, r)$$

6.1 Распределение потока по времени

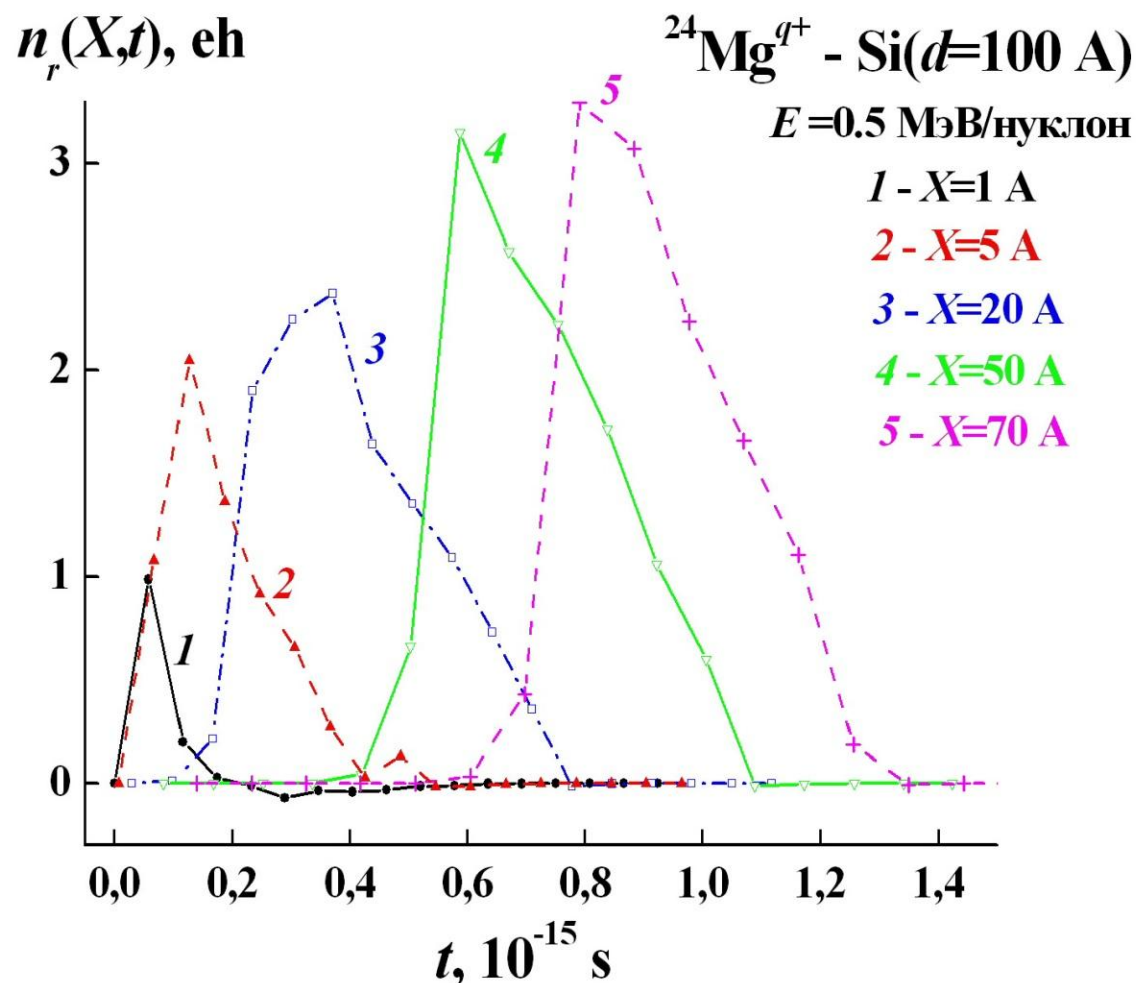


Рис.10 Изменение от времени потоков электронов, пролетающих через поверхность на глубине X . 21/26

6.2 Асимптотическое распределение

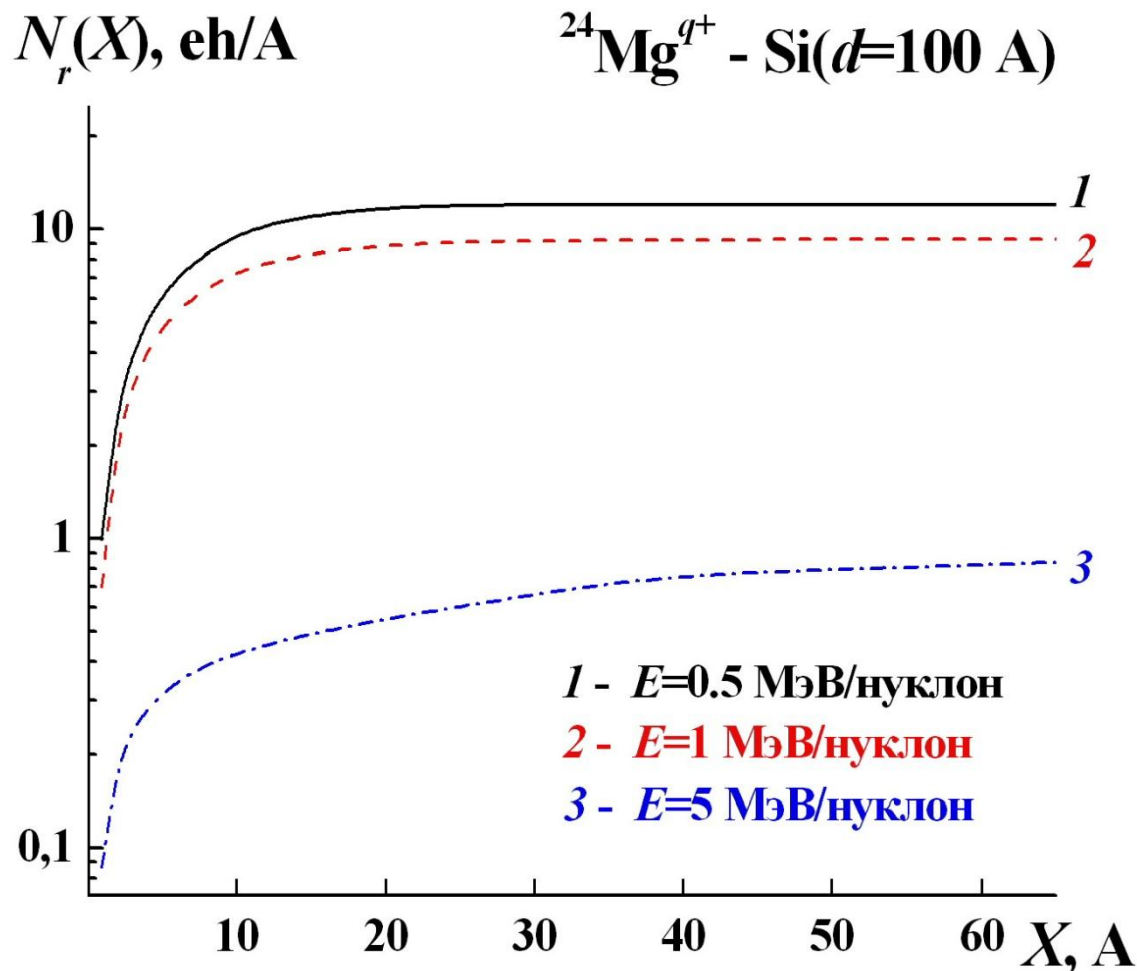


Рис.11 Распределение плотности электронов от глубины

Баланс в слое $N_r(X) \rightarrow N_r^{\max}(X_{\max})$ при $X_{\max} > 20 \text{ \AA}$

$$\sigma_B(E) \Rightarrow N_r^{\max}(E) \downarrow \text{ при } \uparrow E$$

6.2 Асимптотическое распределение

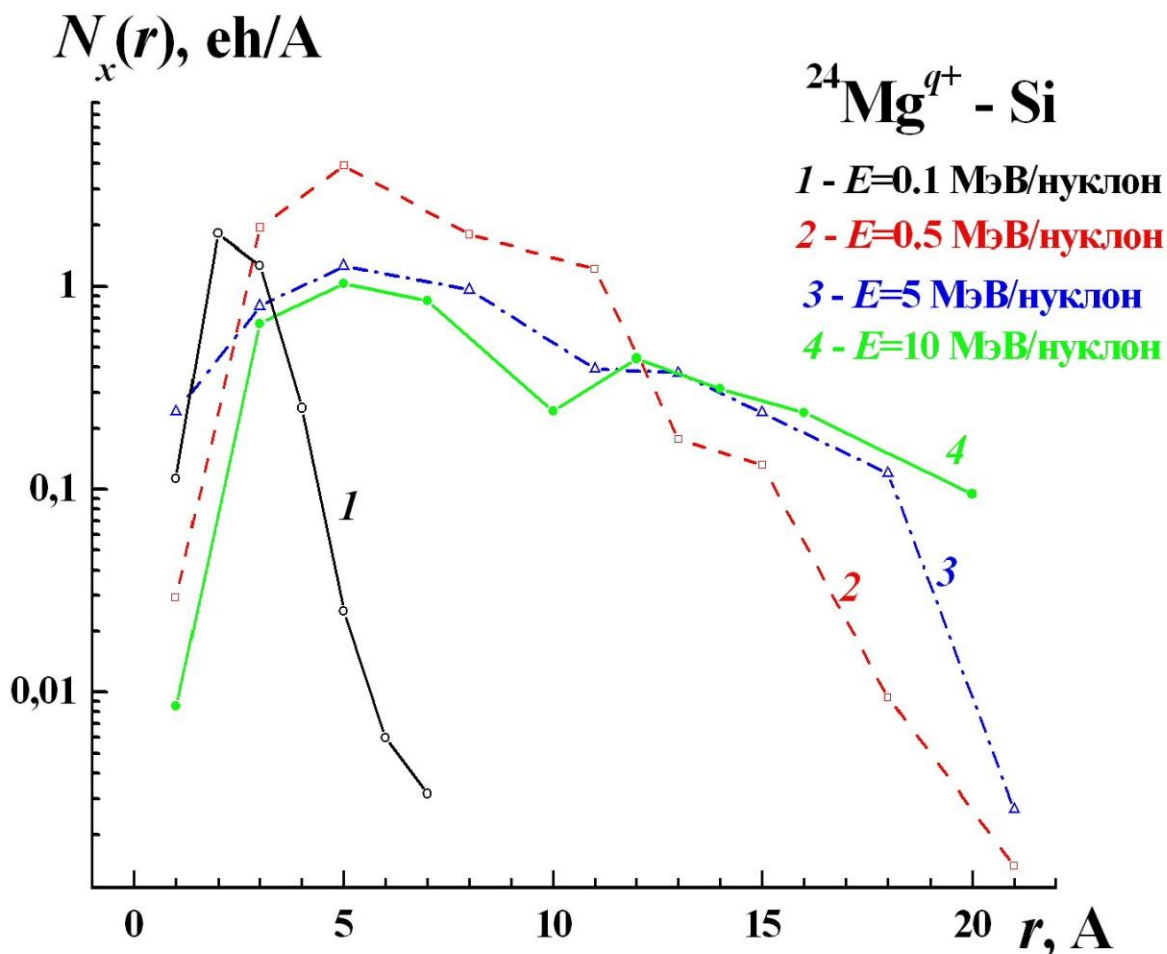


Рис.12 Аксиальный размер распределения электронов.

$$r_{\max}(E) \uparrow \text{ при } \uparrow E$$

Заключение

Предложена модель описания потоков $n(x,r,t)$ и концентраций $N(x,r)$ электронов

1. Равномерное распределение еh-пар вдоль трека
2. Количество электронов
$$\sigma_{\text{exp}}(Z=1, E), \bar{q}(Z, E), C_{gs}(E, \epsilon_{sol})$$
3. Первое борновское приближение
$$F(E, E_k, \theta_j) \quad (k=1, k_{max}; j=1, j_{max})$$
4. $S(E_e)$ [Монте-Карло] + экстраполяция до $E_e = 20$ эВ
5. Трек каждого электрона до $E_e = 20$ эВ

Выводы

Результаты расчетов $^{24}\text{Mg} - \text{Si}(d=100 \text{ \AA})$:

1. Длительность импульса $n(x, r, t)$: $\Delta t \propto 10^{-15} \text{ c}$
2. Асимметрия $n(t)$ за счет $F(E_k, \theta_j)$ и $l(E, \theta)$
3. $n_r(x, t) \rightarrow n_r^{\max}(x, t) \uparrow$ при $x \uparrow$
4. $N_r(X) \rightarrow N_r^{\max}(X_{\max})$; $X_{\max} \approx 20 \text{ \AA}$
5. $N_x(r)$, $r < r_{\max}(E) = 7 - 25 \text{ \AA}$

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации по проекту [«Развитие синхротронных и нейтронных исследований и инфраструктуры для материалов энергетики нового поколения и безопасного захоронения радиоактивных отходов»](#) – грант № 075-15-2021-1353.

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ