УДК 68.55.Ln, 78.50.Ge

М. ДИНЕЙХАН, Ш. Ш. САРСЕМБИНОВ, Ж. Б. БИСАРИЕВА

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МЕХАНИЗМА ФОРМИРОВАНИЯ СВЯЗАННОГО СОСТОЯНИЯ ПРИ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ

Исходя из предположений о том, что число электронов, участвующих в взаимодействии с налетающим ионом при высоких энергиях является конечным, определен потенциал взаимодействия между налетающим ионом и ядром-мишенью. Наши расчеты показали, что с уменьшением расстояния между ионом и ядром-мишенью в твердом теле потенциал взаимодействия переходит от кулоновского к параболическому потенциалу. Это дает возможность объяснить механизм изменения спектра ионной имплантации при высоких энергиях.

1. Введение. Взаимодействие иона с твердотельными поверхностями, как при низких, так и при высоких энергиях является одним из основополагающих методов для получения новых материалов микроэлектроники. По многим прогнозам именно создание новых материалов с заданными свойствами является одним из доминирующих направлений исследовательских работ [1] в XXI веке, подобно тому, как создание атомной электростанции, изобретение транзистора, лазера и др. в XX веке. В настоящее время основной задачей микроэлектроники является уменьшение размера транзистора, т.е. создание сверхбольшой интегральной схемы [1]. Конечно, для осуществления этого процесса в первую очередь необходимо изучить механизм взаимодействия иона с твердым телом при высоких энергиях. Обычно взаимодействие иона с твердым телом, т.е. атомов в теле, осуществляется взаимодействием между электронами и ядром данного атома [2]. Масса электрона по сравнению с массой иона является в несколько тысяч раз меньше, поэтому электрон-ионное взаимодействие доминируется только при низких энергиях, а при высоких энергиях основным доминирующим взаимодействием является взаимодействие иона с ядром. С другой стороны, размер ядра в сотни тысяч раз меньше, чем размер атома, а налетающий ион и ядро-мишень взаимодействуют между собой только кулоновской силой, поэтому при соударении необходимо учесть эффект экранировки электрического заряда, который связан с наличием электронов в атоме.

В настоящий момент механизм взаимодействия иона с твердотельными поверхностями в основном описывается в рамках модели ЛШШ [3]. Теория пробегов ионов в аморфной и кристаллической мишени была построена в 1963 г. датскими физиками Дж. Линдхардом, М. Шарфом и Х. Шиоттом и получила название теории ЛШШ. В модели ЛШШ потенциал взаимодействия между налетающим ионом и ядром-мишенью с учетом эффекта экранировки, который связан с присутствием электронов определяем в рамках приближения Томаса-Ферми [4]. С другой стороны, различие между теоретическими результатами, полученными в рамках ЛШШ метода, с последними экспериментальными данными [5] с увеличением энергии налетающего иона,- возрастает. Это показывает, что модификация потенциала взаимодействия между налетающим ионом и ядром-мишенью в приближении Томаса-Ферми не соответствует реальному механизму взаимодействия этих частиц при высоких энергиях. Это связано с тем, что при определении экранированного потенциала Томаса-Ферми число электронов считают бесконечным, однако в реальном атоме число электронов является конечным. Поэтому, при определении потенциала взаимодействия между ионом и ядром-мишенью необходимо учесть конечность числа электронов.

По нашему мнению, для ответа на эти и другие вопросы существенную роль играют аналитические методы вычисления, т.е аналитическое определение потенциала взаимодействия между ионом и ядер-мишени. Мы также считаем, что связанное состояние, состоящее из иона, ядер-мишени и электронов являются квантово-механическими системами, которые взаимодействуют между собой посредством кулоновских сил. Поэтому структурные формирования этих систем должны определятся в рамках квантово-механического формализма, при этом число электронов должен быть конечным.

Таким образом, описание механизма ион-ядерного взаимодествия при наличии конечного числа электронов является одним из актуальных проблем как фундаментальных, так и практических исследований. Наш результат показывает, что при возрастании энергии налетающего иона расстояние между ионом и ядром-мишенью уменьшается, а потенциал взаимодействия между этими частицами переходит от кулоновского типа к параболическому. Естественно, это приводит к отклонению от кулоновского спектра образованных связанных состояний при высоких энергиях налетающего иона.

Целью данной работы является объяснение механизма взаимодействия ион-ядерной соударения в процессе ионной имплантации с учетом конечного число электронов и аналитическое определение потенциала взаимодействия между налетающим ионом и ядром в рамках метода осцилляторного представления (ОП) [6].

2. Определение потенциала взаимодействия между налетающим ионом и ядром-мишенью

2.1. Формулировка задачи. В методе ЛШШ потенциал взаимодействия между налетающим ионом и ядром-мишенью модифицируются в следущем виде [3]:

$$V(r)=\frac{Z_1Z_2e^2}{r}\varphi\left(\frac{r}{a_{T\Phi}}\right), \tag{1}$$

где Z_1 – заряд налетающего иона, Z_2 – заряд мишени, $a_{T\Phi}$ – радиус экранировки Томаса-Ферми:

$$a_{r_\phi}=\frac{0{,}885a_в}{\left(Z_1^{\frac{2}{3}}+Z_2^{\frac{2}{3}}\right)^{\frac{1}{2}}}, \tag{2}$$

здесь $a_в$ – радиус бора, $\varphi(x)$ – функция экранировки Томаса-Ферми, который обычно определяется из уравнений:

$$\frac{1}{\sqrt{x}}\cdot\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2}=\varphi^{2/3}(x)\,. \tag{3}$$

Это уравнение для электронного газа. Известно, что с возрастанием энергии налетающего иона расстояние между ионом и ядром-мишенью уменьшается, т.е.

$$r_d=\frac{Z_1Z_2e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0E_k}, \tag{4}$$

где r_d – расстояние между ионом и ядром, а E_k – кинетическая энергия налетающих частиц.

С другой стороны, известно, что решение уравнения (3) удовлетворяющее физическим граничным условиям $\varphi(0) = 1$, определяется только численным образом. Поэтому согласно (4) при высоких энергиях налетающей частицы, т.е. при малых расстояниях, поведение потенциала взаимодействия (1) становится более кулоновским. Однако, результаты последных экспериментальных исследований показывают, что спектр связанного состояния, который образован в результате ионной имплантации [5] при высоких энергиях является колебательным, т.е. отличается от кулоновского спектра.

С другой стороны, при возрастании энергии налетающего иона расстояние между ионом и ядром-мешенью уменьшается, а влияние электронов на соседние атомы становится несущественным, т.е. экранирование кулоновского взаимодействия происходит только электронами данного атома-мишени. Таким образом, взаимодействие между налетающим ионом и ядром-мишенью происходит в электрическом поле созданном электронами данного атома. Влияние этого электрического поля отождествляем или заменяем с взаимодействием эффективного заряда $-Z_3e$ с массой $_3$, которая равна суммарной массе электронов в атоме. Таким образом наша задача переходит к рассмотрению трехтельной кулоновской системы состоящей из ядра-мишени с зарядом Z_2e с массой m_2, и налетающего иона с зарядом Z_1e с массой m_1, а также фиктивной частицы с зарядом $-Z_3e$ с массой m_3. Число электронов в атоме является конечным, а масса электрона почти в 2000 раз меньше, чем масса нуклонов, которые находятся в составе налетающего иона и ядра-мишени. Поэтому при дальнейших рассмотрениях будем считать, что масса иона и ядра-мишени в много раз больше, чем масса фиктивной частицы, т.е. $m_1 \succ\succ m_3$, $m_2 \succ\succ m_3$.

2.2. Гамильтониан взаимодействия. Рассмотрим трехтельную систему с кулоновским взаимодействием. Пусть m_1, m_2, m_3 – массы, а Z_1e, Z_2e, $-Z_3e$ – заряды частиц, соответственно. Гамильтониан системы записывается в стандартном виде:

$$H = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{3}\frac{1}{2m_j}\vec{P}_j^2 + \frac{Z_1Z_2e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \frac{Z_1Z_3e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_3|} - \frac{Z_2Z_3e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_3|}. \tag{5}$$

Выбирая систему центра масс $\vec{z}$ и координаты Якоби $\{\vec{x}, \vec{y}\}$ в виде:

$$\vec{r}_1 = \frac{m_2}{m_1 + m_2}\vec{x} + \frac{m_3}{m_1 + m_2 + m_3}\vec{y} + \vec{z},$$

$$\vec{r}_2 = -\frac{m_1}{m_1 + m_2}\vec{x} + \frac{m_3}{m_1 + m_2 + m_3}\vec{y} + \vec{z}, \tag{6}$$

$$\vec{r}_3 = -\frac{m_1 + m_2}{m_1 + m_2 + m_3}\vec{y} + \vec{z},$$

а также проводя некоторые упрощения из (5) для гамильтониана взаимодействия получаем:

$$H = \frac{1}{2M}\vec{P}_x^2 + \frac{1}{2\mu}\vec{P}_y^2 + \frac{Z_1Z_2e^2}{x} - \frac{Z_1Z_3e^2}{|\vec{x}M/m_1 + \vec{y}|} - \frac{Z_2Z_3}{|\vec{x}M/m_2 - \vec{y}|}. \tag{7}$$

Здесь кинетическая энергия полной системы опущена и введены следующие обозначения:

$$M = \frac{m_1m_2}{m_1 + m_2}; \quad \mu = \frac{(m_1 + m_2)m_3}{m_t + m_2 + m_3}. \tag{8}$$

Для удобства в дальнейших вычислениях переходим к безразмерным переменным $(\vec{R}, \vec{r})$:

$$\vec{x} = \frac{1}{Me^2}\vec{R}; \quad \vec{y} = \frac{1}{\sqrt{M\mu}e^2}\vec{r}, \tag{9}$$

тогда для уравнения Шредингера (УШ) получим:

$$\left\{\frac{1}{2}\vec{P}_r^2 + \frac{1}{2}\vec{P}_R^2 + \frac{Z_1Z_2}{R} - \frac{Z_1Z_3\lambda}{|\vec{r} + c_1\vec{R}|} - \frac{Z_2Z_3\lambda}{|\vec{r} - c_2\vec{R}|} + \frac{U}{2}\right\}\psi(\vec{R}, \vec{r}) = 0. \tag{10}$$

Здесь использованы следующие обозначения:

$$\lambda = c_1 + c_2, \quad c_j = \frac{1}{m_j}\sqrt{\frac{m_1m_2m_3}{m_1 + m_2 + m_3}}, \qquad j = 1, 2, \tag{11}$$

а также E – энергетический спектр трехтельной системы параметризован следующим образом:

$$E = -\frac{e^4}{2}\cdot\frac{m_1m_2}{m_1 + m_2}\cdot U, \tag{12}$$

где U – энергетический параметр. Таким образом, безразмерный параметр U определяет энергию системы.

Наша задача состоит в определении из УШ (10) параметра U и волновой функции (ВФ) системы в рамках метода ОП [6].

2.3. Двухцентровое адиабатическое приближение. Адиабатическое приближение является одним из самых распространенных методов в физике и заключается в приближенном разделении “быстрых “ и “медленных” переменных динамической системы. В квантовой механике (КМ) основы адиабатического приближения были заложены Борном и Оппен-геймером [7], а затем Борном и Фоком [8] для решения УШ.

В данном пункте изложим детали применения двухцентрового приближения для решения УШ в кулоновской трехтельной системе в рамках ОП. Мы будем рассматривать трехтельную кулоновскую систему, состоящую из ядра-мишени, иона и фиктивной частицы. Ядро и ион являются сравнительно тяжелыми частицами по сравнению с электроном. Поэтому при определении энергетического спектра и волновой функции данной системы, вполне возможно применение двухцентрового адиабатического приближения [9]. В двухцентровом приближений ВФ системы представляется в виде:

$$\psi(\vec{R},\vec{r}) = \chi(\vec{R}) \cdot \Phi(\vec{R},\vec{r}), \tag{13}$$

где $\Phi(\vec{R},\vec{r})$ – волновая функция внутренней системы, обычно определяется следующим образом:

$$\Phi(\vec{R},\vec{r}) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \tilde{\Phi}_m(R;\rho,z). \tag{14}$$

Здесь φ – азимутальный угол, а m – азимутальное квантовое число. Учитывая (13) и (14) в цилиндрической системе координат, после некоторых упрощений из (10) для УШ имеем:

$$\left\{ -\frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] - \frac{Z_1 Z_3 \lambda}{\sqrt{\rho^2 + z^2 + 2c_1 Rz + c_1^2 R^2}} - \right.$$
$$\left. - \frac{Z_2 Z_3 \lambda}{\sqrt{\rho^2 + z^2 - 2c_2 Rz + c_2^2 R^2}} \right\} \tilde{\Phi}_m(R;\rho,z) = E_r(R)\tilde{\Phi}_m(R;\rho,z), \tag{15}$$

где $E_r(R)$ – является собственным значением гамильтониана внутренней системы. В (15) переменная R рассматривается как внешний параметр. Стандартное вычисление обычно приводит к вытянутым сфероидальным координатам [10], при этом параметр R определяет фокусное расстояние, а $E_r(R)$ – называется термом энергетических уровней. В вытянутых сфероидальных системах координат УШ представленное в (15), допускает разделение переменных и получается два уравнения, которые решаются только численными методами (подробно см. в [10, 11]). В данной работе для определения энергетического терма $E_r(R)$ применим метод ОП.

3. Двухцентровое приближение в ОП

Теперь приступим к вычислению энергетического терма $E_r(R)$ внутренней системы в рамках метода ОП. Для этого проводим замену переменных:

$$\rho = 2\sqrt{\rho_1 \rho_2}, \quad z = (\rho_1 - \rho_2) \tag{16}$$

и перейдем к параболической системе координат. После необходимых вычислений, из (15) имеем:

$$\left\{ -\frac{1}{2}\left[\rho_1 \frac{\partial^2}{\partial\rho_1^2} + \frac{\partial}{\partial\rho_1} + \rho_2 \frac{\partial^2}{\partial\rho_2^2} + \frac{\partial}{\partial\rho_2} - \frac{m^2}{4\rho_1} - \frac{m^2}{4\rho_2} \right] - (\rho_1 + \rho_2)E_r - \right.$$
$$\left. - \frac{Z_1 Z_3 \lambda \cdot (\rho_1 + \rho_2)}{\sqrt{(\rho_1 + \rho_2)^2 + 2c_1 R(\rho_1 - \rho_2) + c_1^2 R^2}} - \frac{Z_2 Z_3 \lambda \cdot (\rho_1 + \rho_2)}{\sqrt{(\rho_1 + \rho_2)^2 - 2c_2 R(\rho_1 - \rho_2) + c_2^2 R^2}} \right\} \tilde{\Phi}_m(r;\rho_1,\rho_2) = 0. \tag{17}$$

Для определения энергетического терма $E_r(R)$ из (16) применим метод ОП. Перед тем как определить энергетический спектр и волновую функцию из УШ (16) с помощью метода ОП [6], уместно напомнить, что этот метод основан на идеях и методах квантовой теории скалярного поля. Одним из существенных отличий квантовой теории поля (КТП) от КМ является то, что квантованные поля, представляющие набор бесконечного числа осцилляторов для основного состояния или вакуума, при квантово-полевом взаимодействии сохраняют свою осцилляторную природу. В КМ собственные функции для большинства потенциалов, как правило отличаются от гауссовского поведения осцилляторной волновой функции. Поэтому для применения методов и идеи КТП к решению квантово-механических задач следует в исходном радиальном УШ провести замену переменных таким образом, чтобы искомая волновая функция на больших расстояниях обладала гауссовским поведением, а трансформированное уравнение идентифицировать с радиальным УШ в пространстве с большой размерностью [6]. Отметим, что впервые похожая идея обсуждалась Фоком при решении задачи о спектре атома водорода с помощью трансформации в четырехмерном пространстве импульсов [12].

Следуя Фоку [13], будем считать асимптотическое поведение волновой функции внутренней системы кулоновским. В соответствии с изложенным выше проведем замену переменных следующим образом (детали см. в [6]):

$$\rho_k = q_k^2, \quad \widetilde{\Phi}_m = q_1^{|m|} q_2^{|m|} \psi_m(q_1^2, q_2^2), \quad k = 1, 2. \tag{18}$$

Используя атомную систему единиц, получим из (3.1) для УШ:

$$\left\{ -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial q_j^2} + \frac{d-1}{q_j}\frac{\partial}{\partial q_1} \right] - \frac{4Z_1 Z_3 \lambda (q_1^2 + q_2^2)}{\sqrt{(q_1^2 + q_2^2)^2 + 2c_1 R(q_1^2 - q_2^2) + c_1^2 R^2}} - 4E_r(q_1^2 + q_2^2) - \right.$$
$$\left. - \frac{4Z_2 Z_3 \lambda (q_1^2 + q_2^2)}{\sqrt{(q_1^2 + q_2^2)^2 - 2c_2 R(q_1^2 - q_2^2) + c_2^2 R^2}} \right\} \psi_m(q_1^2, q_2^2) = 0, \tag{19}$$

где d – размерность вспомогательного пространства, которая равна:

$$d = 2 + 2|m|. \tag{20}$$

В результате замены переменных мы получили модифицированное уравнение Шредингера в d-мерном вспомогательном пространстве R^d. Из (19) и (20) следует, что азимутальное квантовое число m вошло в определение размерности пространства d. Данный прием позволяет определить все интересующие нас характеристики, а именно, спектр и волновую функцию, решая модифицированное УШ только для основного состояния в d-мерном вспомогательном пространстве R^d. Волновая функция $\psi_m(q_1^2, q_2^2)$ основного состояния в R^d зависит только от переменных q_1^2 и q_2^2. Поэтому оператор:

$$\frac{\partial^2}{\partial q_k^2} + \frac{d-1}{q_k}\frac{\partial}{\partial q_k} \equiv \Delta_{q_k}, \quad k = 1, 2, \tag{21}$$

отождествим с лапласианом Δ_{q_k} в вспомогательном пространстве R^d, который действует на волновую функцию основного состояния, зависящую только от радиуса q_k. Исходя из модифицированного УШ:

$$H\psi_m(q_1, q_2) = \varepsilon(E_r)\psi_m(q_1, q_2), \tag{22}$$

согласно (19) получаем, что энергетический спектр в R^d равен нулю:

$$\varepsilon(E_r) = 0. \tag{23}$$

Будем рассматривать это соотношение как условие определения энергетического спектра E_r гамильтониана (15). Следуя методу ОП [6], представим канонические переменные через операторы рождения и уничтожения в пространстве R^d:

$$q_j^{(k)} = \frac{a_j^k + a_j^{k+}}{\sqrt{2\omega_k}};\; P_j^{(k)} = \sqrt{\frac{\omega_k}{2}}\frac{a_j^k - a_j^{k+}}{i};\; k = 1,\, 2;\; j = 1,\, \ldots,\, d;\; \left[a_i^k,\; a_j^{k+}\right] = \delta_{i,\,j}, \tag{24}$$

где ω_k – частота осциллятора, которая пока не известна. Подставляя (24) в (19) и упорядочивая по операторам рождения и уничтожения получаем

$$H = H_0 + \varepsilon_0(E_r) + H_I\,. \tag{25}$$

Здесь H_0 – является гамильтонианом двух не связанных осцилляторов

$$H_0 = \omega_1(a_j^+(1)\cdot a_j(1)) + \omega_2(a_j^+(2)\cdot a_j(2))\,, \tag{26}$$

а $\varepsilon_0(E_r)$ – энергия основного состояния в нулевом приближении ОП [6], которая имеет вид:

$$\varepsilon_0(E_r) = \frac{d}{4}\omega_1 + \frac{d}{4}\omega_2 - 2\frac{dE_r}{\omega_1} - 2\frac{dE_r}{\omega_2} - 4(\omega_1\omega_2)^{d/2}\times\int_0^\infty\int_0^\infty \frac{d\beta_1 d\beta_2}{\Gamma^2(d/2)}\times$$

$$\times\left[\frac{Z_1Z_3(\beta_1\beta_2)^{d/2-1}(\beta_1+\beta_2)}{\sqrt{(\beta_1+\beta_2)^2 + 2c_1R(\beta_1-\beta_2) + c_1^2R^2}} + \frac{Z_2Z_3\lambda(\beta_1\beta_2)^{d/2-1}(\beta_1+\beta_2)}{\sqrt{(\beta_1+\beta_2)^2 - 2c_2R(\beta_1-\beta_2) + c_2^2R^2}}\right]\exp(-\omega_1\beta_1 - \omega_2\beta_2). \tag{27}$$

Гамильтониан взаимодействия H_I, также представляется в нормальной форме по операторам рождения и уничтожения, причем он не содержит квадратичных слагаемых по каноническим переменным:

$$\begin{aligned} H_I = &-\frac{\partial}{\partial\beta}\int_0^\infty \frac{dt}{\sqrt{\pi t}}\int_{-\infty}^\infty \frac{d\tau}{\sqrt{\pi}}e^{-\tau^2}\int\left(\frac{d\eta_1}{\sqrt{\pi}}\right)^d\int\left(\frac{d\eta_2}{\sqrt{\pi}}\right)^d e^{-\eta_1^2-\eta_2^2\cdot 4Z_3\lambda} \\ &\times\Big[\, Z_1\exp\left\{-(c_1R)^2t - \eta_1^2\frac{\mu_1^+}{\omega} - \eta_2^2\frac{\mu_1^-}{\omega}\right\}F\left(2i\sqrt{\mu_1^+}(\eta_1q_1);2i\sqrt{\mu_1^-}(\eta_2q_2)\right) \\ &+ Z_2\exp\left\{-(c_2R)^2t - \eta_1^2\frac{\mu_2^-}{\omega} - \eta_2^2\frac{\mu_2^+}{\omega}\right\}F\left(2i\sqrt{\mu_2^-}(\eta_1q_1);2i\sqrt{\mu_2^+}(\eta_2q_2)\right)\Big]\Big|_{\beta=0}, \end{aligned} \tag{28}$$

где введены обозначения:

$$F(y_1;\, y_2) = :e_2^{-y_1}::e_2^{-y_2}:*:e_2^{-y_2}:(1+\frac{1}{2}:y_1^2) + :e_2^{-y_1}:(1+\frac{1}{2}:y_2^2:);$$

$$\mu_1^\pm = \beta \pm 2R\cdot c_1t + 2i\sqrt{t}\tau; \qquad \mu_2^\pm = \beta \pm 2R\cdot c_2t + 2i\sqrt{t}\tau.$$

Здесь :*: является символом нормального упорядочения и мы использовали обозначение $e_2^x = e^x - 1 - x - x^2/2$. Некоторые детали представления гамильтониана в нормальной форме приведены в Приложении.

Вклад гамильтониана взаимодействия H_I рассматривается как малое возмущение. В квантовой теории поля, после представления гамильтониана взаимодействия в нормальной форме требование отсутствия в гамильтониане взаимодействия полевых операторов второй степени по существу эквивалентно перенормировкам константы связи и волновой функции [14]. Более того, такая процедура позволяет учесть основной квантовый вклад через перенормировку масс и энергии вакуума. Другими словами, все квадратичные формы полностью включены в гамильтониан свободного осциллятора. Данное требование позволяет сформулировать согласно осциллятор ному представлению, условия [6]

$$\frac{\partial \varepsilon_0(E)}{\partial \omega_1} = 0, \quad \frac{\partial \varepsilon_0(E)}{\partial \omega_2} = 0 \tag{29}$$

для нахождения частоты ω_1 и ω_2 не связанных осцилляторов, которые определяют основной квантовый вклад. Таким образом, учитывая (27), из уравнений (23) и (29) мы можем определить энергию E_r внутренней системы как функцию от параметра R .

4. Определение зависимости термов двух кулоновских центров от R

Приступим к определению зависимости терма двух кулоновских центров от параметра R в нулевом приближении ОП. Учитывая (27) из системы уравнений (23) и (29) определим частоту осциллятора ω_1 и ω_2, а также энергетический спектр внутренней системы $E_r(R)$, как функцию параметра R. Конечно, в общем случае эти системы аналитически не решаются, поэтому рассмотрим частный случай. Рассмотрим случай, когда $R = 0$, тогда из (27) имеем:

$$\varepsilon_0(E_r) = \frac{d\omega_1}{4} + \frac{d\omega_2}{4} - 2\frac{dE_r}{\omega_1} - 2\frac{dE_r}{\omega_2} - 4Z_3\lambda(Z_1 + Z_2)\,. \tag{30}$$

В этом случае, из (29) получаем:

$$\omega_1 = \omega_2 = \sqrt{-8E_r}\,. \tag{31}$$

Частоты осцилляторов одинаковы. Рассмотрим другой предельный случай, когда $R = \infty$, тогда из (27) имеем:

$$\varepsilon_0(E_r) = \frac{d\omega_1}{4} + \frac{d\omega_2}{4} - 2\frac{dE_r}{\omega_1} - 2\frac{dE_r}{\omega_2}\,. \tag{32}$$

Таким образом, в пределах $R = 0$ или $R = \infty$, частота осцилляторов равны, а термы определяются аналитически. Теперь приступим к определению частоты осцилляторов и термов двух кулоновских центров при значении параметра R : $0 \prec R \prec \infty$. Вводим новые параметры:

$$\omega_+ = \frac{\omega_1 + \omega_2}{2}, \quad \omega_- = \frac{\omega_1 - \omega_2}{2}, \tag{33}$$

и эти параметры также зависят от R. Согласно (31) при R = 0 и $R = \infty$ параметр ω_- равен нулю, т.е параметр определяет дипольный характер взаимодействия. В этих параметрах (33) энергетический спектр модифицированного УШ в нулевом приближении для основного состояния ($m = 0$) выражается в следующем виде:

$$\varepsilon_0(E_r) = \omega_+ - 8\frac{dE_r\omega_+}{\omega_+^2 - \omega_-^2} - 4(\omega_+^2 - \omega_-^2)\int_0^\infty\int_0^\infty d\beta_1 d\beta_2 \exp\{-\omega_+(\beta_1+\beta_2) - \omega_-(\beta_1-\beta_2)\}$$

$$\left[\frac{Z_1Z_3\lambda(\beta_1+\beta_2)}{\sqrt{(\beta_1+\beta_2)^2 + 2c_1R(\beta_1-\beta_2) + c_1^2R^2}} + \frac{Z_2Z_3\lambda(\beta_1+\beta_2)}{\sqrt{(\beta_1+\beta_2)^2 - 2c_2R(\beta_1-\beta_2) + c_2^2R^2}}\right]. \tag{34}$$

Для дальнейших вычислений проводим замену переменных:

$$\beta_1 = \frac{s+t}{\sqrt{2}};\ \beta_2 = \frac{t-s}{\sqrt{2}};\ s = xt;\ \omega = \omega_+;\ \gamma = \frac{\omega_-}{\omega_+};\ b_j = c_jR;\ j = 1,\ 2, \tag{35}$$

и после некоторых упрощений из (34) имеем:

$$\varepsilon_0(E_r) = \omega - 8\frac{dE_r}{\omega}\cdot\frac{1}{1-\gamma^2} - 2\omega^2(1-\gamma^2)\int_0^\infty t^2dt\int_{-1}^1 dx\left\{Z_1b_1^2e^{-b_1t\omega(1+x\gamma)} + Z_2b_2^2e^{-b_2t\omega(1-x\gamma)}\right\}\frac{Z_3\lambda}{\sqrt{1+2xt+t^2}}. \tag{36}$$

Тогда, согласно (23), (29) и (36), термы двух кулоновских центров определяются следующим образом:

$$E_r = \min_{\omega,\gamma}\left\{\frac{\omega^2(1-\gamma^2)}{8} - \frac{\omega^3(1-\gamma^2)^2}{4}\times\right.$$

$$\left.\times\int_0^\infty t^2dt\int_{-1}^1 dx\left\{Z_1b_1^2e^{-b_1t\omega(1+x\gamma)} + Z_2b_2^2e^{-b_2t\omega(1-x\gamma)}\right\}\times\frac{Z_3\lambda}{\sqrt{1+2xt+t^2}}\right\}. \quad (37)$$

Интеграл в (37) вычисляется численным образом. Однако, при у «1 проводя разложение по степеням y, (37) можно вычислить аналитически. Детали вычисления интегралов в этом приближений представлены в Приложении. В этом случае для терма E_z, из (37) получаем:

$$E_r = \frac{\omega^2}{8} - \frac{Z_3\omega\lambda}{8}\left[Z_1\cdot J_1^{(0)}(R) - Z_2\cdot J_2^{(0)}(R)\right] -$$

$$-\frac{1}{2}\frac{Z_3\lambda\omega\cdot\left[Z_1J_1^{(1)}(R) - Z_2J_2^{(1)}(R)\right]}{4\left[Z_1J_1^{(0)}\cdot(R) - Z_2J_1^{(0)}\cdot(R)\right] - \left[Z_1\cdot J_1^2(R) - Z_2J_2^{(2)}(R)\right]} \quad (38)$$

и как обычно частота осциллятора определяется из уравнения:

$$\omega - 2Z_1Z_3\lambda(1+\omega c_1R)e^{-\omega c_1R} - 2Z_2Z_3\lambda(1+\omega c_2R)e^{-\omega c_2R} = 0\,. \quad (39)$$

В (38) использованы следующие обозначения:

$$J_j^{(0)}(R) = 2\frac{1-e^{-\omega b_j}}{\omega b_j} - e^{-\omega b_j}; \quad j = 1,2;$$

$$J_j^{(1)}(R) = 8\frac{1-e^{-\omega b_j}}{\omega^2b_j^2} - 8\frac{e^{-\omega b_j}}{\omega b_j} - 4e^{-\omega b_j} - \omega b_je^{-\omega b_j}; \quad (40)$$

$$J_j^{(2)}(R) = 96\frac{1-e^{-\omega b_j}}{\omega^3b_j^3} - 96\frac{e^{-\omega b_j}}{\omega^2b_j^2} - 48\frac{e^{-\omega b_j}}{\omega b_j} + 8\frac{1-e^{-\omega b_j}}{\omega b_j} - 22e^{-\omega b_j} - 6\omega b_je^{-\omega b_j} - \omega^2b_j^2e^{-\omega b_j}.$$

Мы получили аналитические выражения терма двух кулоновских систем. Из выражения (40), можно легко установить, что в пределе $R\to 0$ $J_j^{(0)}$ и $J_j^{(1)}$ – стремятся к постоянными $J_j^{(1)}(R)$ становится пропорциональным к $J_j^{(1)} \sim R$.

Учитывая (13) и (15) и проводя усреднение полного гамильтониана (10) по $\Phi(R,\vec{r})$ – волновой функции внутренней системы, после простых преобразований имеем:

$$\left[\frac{1}{2}\vec{P}_R^2 - \frac{Z_1Z_2}{R} + V(R) + \frac{1}{2}U\right]\chi(R) = 0\,, \quad (41)$$

где использовано обозначение:

$$V(R) = E_r(R) + \frac{1}{4}\left(\frac{1}{\omega}\cdot\frac{\partial\omega}{\partial R}\right)^2. \quad (42)$$

Первое слагаемое в (42) $E_r(R)$ – потенциал, созданный электрическим полем заряда Z_3, а второе слагаемое связано с относительным движением частиц 1 и 2. В работе [15] показано, что вклад второго слагаемого по сравнению с первым является на порядок меньше. Таким образом, определение энергетического спектра и ВФ трехтельной системы с кулоновским взаимодействием сводится к вычислению энергетического спектра двухтельной системы с добавочным потенциалом взаимодействия.

5. Механизм формирования связанного состояния

Мы предполагаем, что все характеристики данной системы описываются решением УШ. Если характеристики системы описываются решением УШ, то динамика и свойства системы определяются потенциалом взаимодействия. Поэтому, мы изучаем свойство потенциала взаимодействия связанного состояния образованной в результате соударения ионов с твердотельными поверхностями.

Согласно (41), полный потенциал взаимодействия между ионом и ядро-мишенью равен:

$$V_{tot}(R) = \frac{Z_1 Z_2}{R} + E_r(r) + \frac{1}{4}\left(\frac{1}{\omega}\frac{\partial \omega}{\partial R}\right)^2 . \tag{43}$$

При дальнейших вычислениях не будем учитывать вклад связанный с относительным движением частиц. Согласно (30) и (32), вклад дилольного взаимодействия, при $R = 0$ и $R = \infty$ равен нулю, а при значениях $0 \prec R \prec \infty$, по сравнению с сферически-симметричными частями потенциала на порядок меньше, поэтому наш полный потенциал в этом приближении равен:

$$V_{tot}(R) = \frac{Z_1 Z_2}{R} + \frac{\omega^2}{8} - \frac{Z_3 \omega \lambda}{2} \cdot \left[Z_1 \cdot \left(2\frac{1-e^{-\omega c_1 R}}{\omega c_1 R} - e^{-\omega c_1 R} \right) + Z_2 \cdot \left(2 - \frac{1-e^{-\omega c_2 R}}{\omega c_2 R} - e^{-\omega c_2 R} \right) \right], \tag{44}$$

а параметр ω – определяется из уравнения (39) как функция от R. Наш потенциал, представленный в (44), описывает трехтельную кулоновскую систему, состоящую из двух тяжелых и одной легкой заряженной частицы.

Теперь оценим, какие энергетические уровни являются устойчивыми. Для этого рассмотрим предельный случай $R \prec\prec 1$. В этом пределе из (44) и (39) имеем:

$$E_r(R) = -\frac{\omega_0^2}{8} + \frac{\omega_0^3}{12} \cdot R^2 Z_3 \lambda (Z_1 c_1^2 + Z_2 c_2^2), \tag{45}$$

где использованы обозначения:

$$\omega_0 = 2 Z_3 \lambda (Z_1 + Z_2). \tag{46}$$

Мы определили энергетический терм внутренней системы. Однако, этот терм при изучении свойств ядер ионного взаимодействия является потенциальным. Таким образом наш потенциал, который способствует образованию связанного состоянии является параболическим. Это приводит к колебательному спектру данного связанного состояния, которое образуется в результате ионной имплантации при высоких энергиях.

6. Заключение. Полагая, что трехтельная система, состоящая из иона, ядра и фиктивной частицы, которые взаимодействуют между собой кулоновскими парными силами, образует квантово-механическую систему, определили потенциал взаимодействия между ионам и ядром.

Показали, что трехчастичная структура данного состояния приводит к появлению добавочного потенциала взаимодействия между ионом и ядром. Структура добавочного потенциала зависит как от зарядовой, так и от изотопической структур трехтельнои системы. Именно, дополнительное взаимодействие между ионом и ядром-мишенью обеспечивает связанное состояние в ион-ядерной системе.

С возрастанием энергии налетающего иона потенциал взаимодействия переходят от кулоновского к параболическому типу. Следовательно спектр связанного состояния, который образуется в результате ионной имплантации при высоких энергиях, отличается от кулоновского спектра. С другой стороны масса $m_ъ$ является малой величиной. В частности, если твердотельной поверхностью является кремний, а налетающей частицей протон с массами равными $m_1 = m_n$, $m_2 = 28m_n$, $m_3 = \frac{14}{1836}m_n$ соответственно, тогда, согласно (36) λ является малой величиной, т.е. глубина потенциальной ямы становится невелика и при незначительном возрастания температуры (кинетической энергии) при ожоге протон освобождается от связанного состоянии.

Приложение

Важным элементом вычислений в ОП [6] является представление канонических переменных в нормальной форме. Поэтому придем некоторые детали этого представления для различных потенциалов. Рассмотрим выражение

$$I = \frac{q^2}{\sqrt{q^4 + 2\gamma x q^2 + \gamma^2}} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\int_0^\infty \frac{dt}{\sqrt{\pi t}} \exp\left[-\beta q^2 - t\left(q^4 + 2\gamma q^2 + \gamma^2\right)\right]\Big|_{\beta=0}, \tag{П.1}$$

где q_j является вектором d-мерного вспомоготельного пространство R^d. Используя соотношения $\left(q_{j,}\eta_j \in R^d\right)$

$$\exp(-tq^4) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tau}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\tau^2 - 2i\sqrt{t}\,\tau q^2\right),$$

$$\exp(-q^2 k) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d\eta}{\sqrt{\pi}}\right)^d \exp[-\eta^2 - 2i\sqrt{k}\left(q\eta\right)], \tag{П.2}$$

и также учитывая представления (24) для q_j и упорядочивая по оператором рождения a_j^+ и уничтожения a_j из (П.1) получаем

$$I = -\frac{\partial}{\partial\beta}\int_0^\infty \frac{dt}{\sqrt{\pi t}} \exp(-\gamma^2 t) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial\tau}{\sqrt{\pi}} \exp(-\tau^2) \times \int \left(\frac{d\eta}{\sqrt{\pi}}\right)^d \exp[-\eta^2 (1 + \frac{k}{\omega})] : \exp\left[-2i\sqrt{k}\left(q\eta\right)\right] : \Big|_{\beta=0}, \tag{П.3}$$

здесь

$$k = \beta + 2\gamma x t + 2i\sqrt{t}\cdot\tau\,. \tag{П.4}$$

С помощью этого представления получены выражения для энергии основного состояния $\varepsilon_0(E)$ в (27) и для гамильтониана взаимодействия H_I в (28).

В этом пункте приведем некоторые детали вычисления интегралов:

$$J_j = \int_0^\infty\int_0^\infty \frac{d\beta_1 d\beta_2}{\Gamma^2(d/2)} \cdot \frac{(\beta_1\beta_2)^{d/2-1}(\beta_1 + \beta_2)\exp(-\omega_1\beta_1 - \omega_2\beta_2)}{\sqrt{b_j^2 - 2b_j(\beta_1 - \beta_2) + (\beta_1 + \beta_2)^2}}\,. \tag{П.5}$$

Прежде всего проводим замены переменных:

$$s = \frac{\beta_1 - \beta_2}{\sqrt{2}}, \quad t = \frac{\beta_1 + \beta_2}{\sqrt{2}}, \quad \beta_1 = \frac{s + t}{\sqrt{2}}, \quad \beta_2 = \frac{t - s}{\sqrt{2}}\,. \tag{П.6}$$

После замены переменных интеграл (П.5) перепишем в виде

$$J_j = \frac{b_j^d}{2^{d-1}}\int_0^\infty dt \int_{-1}^{1} dx \frac{\left(1 - x^2\right)^{d/2 - 1} t^d}{\Gamma^2\left(d/2\right)} \times \frac{\exp\left[-\omega_+ t b_j - \omega_- x t b_j\right]}{\sqrt{1 - 2xt + t^2}}, \tag{П.7}$$

где

$$\omega_{+} = \frac{\omega_1 + \omega_2}{2}, \ \omega_{-} = \frac{\omega_1 - \omega_2}{2}, \ d = 2 + 2|m|.$$

Рассмотрим простой случай $|m| = 0$. Тогда с помощью (35) после некоторых простых упрощений имеем

$$J_j = b_j^2 \omega^2 \int_0^\infty dt t^2 \int_{-1}^1 dx \cdot \frac{\exp[-\omega t b_j (1 + x\gamma)]}{\sqrt{1 - 2xt + t^2}} = b_j^2 \omega^2 \int_0^\infty dt t^2 \exp(-\omega t b_j) \sum_{k=0}^\infty \frac{(-1)^k t^k b_j^k \omega^k \gamma^k}{k!} I_k, \quad (П.8)$$

где

$$J_k = \int_{-1}^1 dx \frac{x^k}{\sqrt{1 - 2xt + t^2}}. \quad (П.7)$$

В низших порядках по параметру γ интегралы (П.8) вычисляются аналитически:

$$1 + t - |1 - t| = \begin{cases} 2t, & |t| \le 1 \\ 2, & |t| \ge 1. \end{cases}$$

$$(1 + t)^3 - |1 - t|^3 = \begin{cases} 2t(3 + t^2), & |t| \le 1 \\ 2(1 + 3t^2), & |t| \ge 1. \end{cases}$$

$$(1 + t)^5 - |1 - t|^5 = \begin{cases} 2t(5 + 10t^2 + t^4), & |t| \le 1 \\ 2(1 + 10t^2 + 5t^4), & |t| \ge 1. \end{cases}$$

и

$$\int_0^1 dt t^n e^{-At} = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial A^n} \int_0^1 dt e^{-At} = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial A^n} \frac{1 - e^{-A}}{A}, \ \text{n=0,1,...} \quad (П.10)$$

С помощью этих соотношений получены выражении (38), (40) и потенциал взаимодействия (42).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Кобаяси Н.* Введение в нанотехнологию. М.: БИНОМ, 2005.

2. Ионная имплантация в полупроводники и другие материалы. Сборник статей / Пер. с англ. под ред. В. С. Вавилова. М.: Мир, 1980.

3. *Lindhard J., Scharff M., Schiott H.T., K.Dan Vidensk.* Selik. // Matt-Fys. Medd., 33, 14(1963).

4. *Gombas P.* Die Statistische Theorie des Atoms, Springer, (Vienna, 1949); *Lindhard J.* Scharff. M.: Phys. Rev., 124, 128(1961).

5. *Combasson J.L., Farmery B.W.,* et al. // Rad. Effects, 36, p.149(1978); Joachim R, Jord W. // Phys. Rev. B,14161, p. 48(1993); *Tokmoldin S., Abdullin Kh., Issova A., Kikkarin S., Mukashev B., Serikkanov A.* // Computational Materials Sciense, 33, p. 141(2005).

6. *Dineykhan M., Efimov G.V.* // Phys. Part. Nucl. 26, 275(1995); *Dineykhan M., Efimov G.V., Ganbold G., Nedelko S.N.* Oscillator representation in quantum physics, Lecture Notes in Physics, m 26, Springer-Verlag, Berlin (1995).

7. *Born M., Oppenheimer R.* // Ann. d. phys., Bd84, 457(1927).

8. *Born M., Fock V.* // Zs. phys., Bd51, 165(1928).

9. *Komarov I.V., Ponomarev L.I., Slavyanov S.Yu.* Spheroidal and Coulomb Spheroidal Functions (Nauka, Moscow, 1976); *Vinitski S.I., Ponomarev L.I.* // Sov Jour. Part. Nucl., 13, 557(1982).

10. *Abramowitz M., Stegun.* Handbook of mathematical functions with formulas graphs and mathematical tables, National bureau of Standorts Applied Mathematics. Series,(1964).

11. *Solov'ev E.A.* // Usphehi Phys. Nauk, 157, 437(1989); Jaffe G. // Z. Phys., 87, 535(1934); Beber W.G. Hasse H.R. // Proc. Cambr. Philos. Soc., 31, 564(1935); Bates D.R., Ledsham K., Stewart A.L. // R.Sos. London, Ser. A 246, 215(1953).

12. *Fock V.A.* The Principles of Quantum Mechanics (Mir, Moscow, 1978).

13. *Fok V.A.* // Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Fiz. 18, 161(1954).

14. *Fradkin E.S.* // Nucl. Phys. 49, 624(1963); *Hayashi K., Hirayama M.,* et al. // Fortschr. Phys. 15, 625(1967); *Salam A.* Nonpolynomial Lagrangians. Renormalization and Gravity. Gordon and Breach Science Publ., N.Y. (1971).

15. *Dineykhan M., Zhaugasheva S.A., Nazmitdinov R.G.* // Jour. Exper. Theor. Phys., 92, 1049(2001).

Резюме

Жоғарғы энергияда ұшып жүрген иондармен әсерлесуге қатысушы электрондар саны ақырғы болып табылады. Ион мен нысана-ядро арасындағы әсерлесу потенциалы анықталды. Біздің есептеулер бойынша ион мен нысана-ядро арасындағы қашықтық жақындаған сайын қатты денеде әсерлесу потенциалы кулондық потенциалдан параболалық потенциалға ауысатындығын көрсетті. Бұл жоғарғы энергияда иондық имплантация спектрінің өзгеру механизмін түсіндіруге мүмкіндік береді.

Поступила 2.12.07г.