

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 29.19.31; 29.19.21

МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ЭФФЕКТ В КРЕМНИИ, ОБЛУЧАЕМОМ ЛЕГКИМИ ИОНАМИ: МЕХАНИЗМ ЯВЛЕНИЯ

© 2007 г.

*А.И. Титов*¹, *А.Ю. Азаров*², *Л.М. Никулина*¹, *С.О. Кучеев*³

¹ Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

² ОАО «Электрон-Оптроник», Санкт-Петербург

³ Лоуренс Ливерморская национальная лаборатория, США

vestnik_nngu@mail.ru

Поступила в редакцию 23.05.2007

Исследовался молекулярный эффект (МЭ) в Si, облучаемом при комнатной температуре ионами N_1^+ и N_2^+ с энергией 40 кэВ/атом при различной скорости набора дозы (от 1.5×10^{11} до 6.2×10^{12} атом·см⁻²·с⁻¹) методом спектрометрии резерфордского обратного рассеяния и методом, основанным на дифракции отражения электронов. Показано, что эффективность МЭ уменьшается при увеличении потока ионов, для наибольшей величины МЭ отсутствует. Этот результат показывает, что общепринятый механизм МЭ, основанный на перекрытии субкаскадов столкновений с образованием локального нелинейного энергетического пика, не подходит для случая облучения легкими ионами. Развита модель, основанная на зависимости скорости комплексообразования от эффективной плотности каскадов столкновений. Показано, что предложенная модель хорошо описывает экспериментальные результаты.

Введение

Облучение атомарными ионами уже в течение нескольких десятилетий широко применяется для модификации и анализа свойств материалов. В то же время интерес к использованию молекулярных (или кластерных) ионов возник сравнительно недавно [1–13]. Этот интерес вызван особенностями бомбардировки такими ионами и уникальными возможностями, которые они открывали для модификации и анализа. Действительно, эффективность многих процессов, протекающих при ионном облучении (таких, например, как распыление, перемешивание, ионная и электронная эмиссии, образование дефектов), в расчете на один падающий атом отличается при бомбардировке атомарными и молекулярными ионами [1–13]. Это явление носит название молекулярный эффект (МЭ). Для случая накопления дефектов эффективность МЭ может быть оценена как

$$g = \frac{n_{dk}}{kn_{d1}}, \quad (1)$$

где n_{dk} – число дефектов, созданных молекулярным ионом X_k^+ , состоящим из k атомов, и n_{d1} – то же для атомарного иона X^+ . Чем больше различие между величиной γ и единицей, тем сильнее молекулярный эффект (при $\gamma = 1$ МЭ отсутствует). В некоторых случаях эффективность МЭ может быть исключительно велика. Так, например, при облучении GaN ионами Bi_1 и Bi_2 средних энергий количество созданных устойчивых дефектов отличается более чем на порядок [8].

Принято считать, что за увеличение накопления разупорядочения при МЭ ответственны нелинейные энергетические пики, которые образуются при перекрытии каскадов столкновений, созданных составляющими молекулярный ион атомами. В литературе встречаются различные критерии возникновения нелинейных эффектов в дефектообразовании: а) плотность столкновений в каскаде столь высока, что их уже нельзя рассматривать как парные столкновения [1, 2]; б) средняя доля смещенных в каскаде атомов превышает критическую долю, необходимую для спонтанного перехода разупорядоченной кристаллической области в

аморфное состояние [13]; и/или в) средняя выделенная энергия на атом решетки превышает энергию, необходимую для плавления [14]. Концепция нелинейных энергетических пиков объясняет (по крайней мере качественно) экспериментальные результаты при аморфизации полупроводников, бомбардируемых тяжелыми ионами средних энергий. В то же время при облучении легкими ионами, а также тяжелыми ионами больших энергий, каскады столкновений нельзя считать в целом нелинейными [6, 15]. Тем не менее, МЭ для таких условий облучения экспериментально наблюдается (см., например [6, 15] и сноски в них¹).

МЭ для случая облучения легкими ионами обычно объясняют нелинейными энергетическими пиками, образующимися при перекрытии относительно плотных субкаскадов столкновений. Такие субкаскады могут образовывать внутри индивидуального каскада столкновений области с высокой плотностью выделенной энергии. Возникновение МЭ при этом происходит, если перекрытие таких субкаскадов, созданных различными компонентами молекулярного иона, приводит к образованию областей с плотностью атомных смещений и/или выделенной энергии, достаточной для существования нелинейного энергетического пика. Если за молекулярный эффект ответственны нелинейные энергетические пики, тогда эффективность МЭ не должна зависеть от потока ионов F при наборе дозы. Действительно, время генерации пика смещений и/или термализации энергетического пика t_s порядка 1–10 пс. Согласно оценкам, приведенным далее, для типичных потоков, которые используются при ионной имплантации, вероятность перекрытия двух каскадов, созданных двумя различными молекулярными ионами, за столь короткое время исключительно мала. Это и приводит к выводу, что эффективность γ не должна зависеть от F .

¹ Необходимо отметить, что измерения эффективности МЭ при облучении легкими ионами не всегда корректны. При облучении кремния легкими ионами число и распределение по глубине образующихся устойчивых дефектов существенно зависят от плотности ионного тока. Следовательно, для корректного сопоставления результатов при облучении атомарными и молекулярными ионами необходимо поддерживать одинаковыми не только энергию и дозу ионов (в кэВ/атом и в атом/см², соответственно), но и величину потока (в атом/(см²·с)) [16].

В данной работе мы исследовали эффективность МЭ от потока ионов F при облучении кремния. Обнаруженная сильная зависимость

$\gamma(F)$ показывает, что общепринятый механизм нелинейных энергетических пиков не подходит для случая облучения легкими ионами. Для объяснения экспериментальных результатов нами разработана модель, основанная не на нелинейных энергетических пиках, а на нелинейных процессах формирования кластеров устойчивых дефектов.

Методика экспериментов

Легированные бором образцы Si (111) ($\rho \sim 1$ Ом·см) облучались при комнатной температуре ионами N_1^+ и N_2^+ с энергией 40 кэВ/атом. Поток ионов выдерживался одинаковым для случаев облучения атомарными и молекулярными ионами и изменялся в диапазоне $1.5 \times 10^{11} - 6.2 \times 10^{12}$ атом·см⁻²·с⁻¹. Увеличение температуры образца во время облучения при наибольшем потоке не превышало 15°С. Облучение проводилось под углом 11.5° к нормали, чтобы избежать осевого и плоскостного каналирования. Степень разупорядочения облученных образцов измерялась методом спектрометрии резерфордовского обратного рассеяния в условиях каналирования (RBSC) и методом, основанным на дифракции отражения электронов (EBSD). Облучение и RBSC-измерения проводились на 500 кэВ ускорителе High Voltage Engineering в лаборатории ОАО «Электрон-Оптроник», EBSD-измерения – на оригинальной установке на кафедре физической электроники СПбГПУ.

RBSC-анализ проводился при падении пучка ионов $^4\text{He}^{2+}$ с энергией 0.7 МэВ вдоль направления $\langle 111 \rangle$ с детектором отраженных ионов, стоящим под углом 103° к направлению падения. Такая геометрия с детектором под углом скольжения 13° позволяет получить увеличенное разрешение по глубине, необходимое для обнаружения приповерхностного пика дефектов. Все RBSC-спектры обрабатывались с помощью алгоритма [17], позволяющего определить эффективное число рассеянных центров. Отношение этого числа к атомной концентрации кремния применялось нами как мера относительного разупорядочения. Для перевода шкалы энергий RBSC-спектров в шкалу глубин использовалась

энергетическая зависимость неупругих потерь энергии ионов гелия [18].

EBSD-метод основан на анизотропии неупругого отражения электронов от монокристаллов [19, 20], объясняемой динамической теорией дифракции [21]. Контраст на картинах электронного каналирования зависит от степени совершенства кристаллической структуры, что делает возможным количественный анализ нарушений, введенных ионным облучением [22, 23]. EBSD-измерения при последовательном снятии тонких поверхностных слоев позволяют получить распределение дефектов по глубине [24–26]. Пошаговое удаление слоев толщиной около 9 нм осуществлялось анодным окислением Si в 4% растворе KNO_3 в этиленгликоле в режиме постоянного тока с последующим растворением окисла в HF [27].

Результаты и обсуждение

На рис. 1 приведены профили относительного разупорядочения по глубине в Si, облученном при комнатной температуре ионами N_1^+ и N_2^+ с энергией 40 кэВ/атом при величине потока 6.2×10^{11} атом·см⁻²·с⁻¹. Из рис. 1

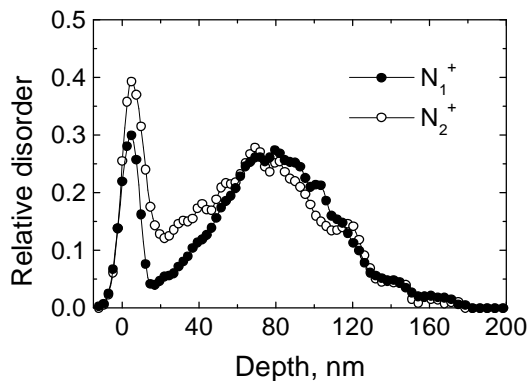


Рис. 1. Профили относительного разупорядочения по глубине в Si, облученном ионами N_1^+ (закрыты символы) и N_2^+ (открытые символы) с энергией 40 кэВ/атом. Доза облучения и плотность потока части составляли 2×10^{15} атом·см⁻² или 6.2×10^{11} атом·см⁻²·с⁻¹ соответственно

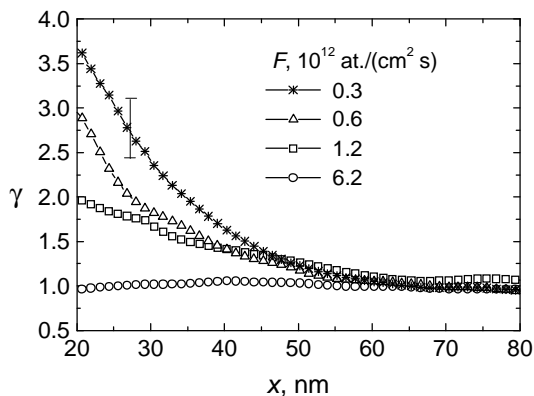


Рис. 2. Зависимость эффективности МЭ от глубины для различных потоков ионов N_1^+ и N_2^+ с энергией 40 кэВ/атом в Si

видно, что распределение по глубине имеет бимодальный характер – наряду с ожидаемым объемным пиком дефектов, расположенным вблизи максимума упругих потерь энергии, имеется ярко выраженный приповерхностный пик. Столь существенное поверхностное разупорядочение согласуется с предыдущими исследованиями при бомбардировке кремния легкими ионами [16, 28]. Наблюдаемый на RBSC-спектрах поверхностный пик дефектов в действительности представляет собой тонкий аморфный слой [29], образование которого объясняется диффузией генерируемых ионным облучением точечных дефектов к поверхности с последующей их сегрегацией на границе аморфный слой / кристалл [30]. Из рис. 1 видно, что облучение молекулярными ионами N_2^+ приводит к более высокому уровню разупорядочения в области между поверхностным и объемным пиками, чем облучение ионами N_1^+ . Это свидетельствует о наличии молекулярного эффекта с величиной $\gamma > 1$.

Следует отметить, что дозовые зависимости накопления дефектов в случае облучения кремния при комнатной температуре легкими ионами имеют сигмоидальный характер [16]. При этом быстрый рост разупорядочения начинается после достижения уровня, большего 0.2. Принято считать, что при таком уровне относительного разупорядочения дефектный кристалл не стабилен и скачком переходит в аморфное состояние при дальнейшем облучении [16]. Чтобы упростить последующее количественное описание МЭ, рассмотрим только экспериментальные результаты с уровнем относительного разупорядочения менее 0.15, когда переход кристаллической фазы в аморфную еще не произошел.

На рис. 2 показаны зависимости эффективности МЭ γ от глубины при различной скорости набора дозы, полученные из RBSC-спектров. Из рис. 2 видно, что γ имеет максимальную величину вблизи поверхности и уменьшается с ростом глубины для значений потока, при которых $\gamma > 1$. Уменьшение эффективности МЭ с ростом глубины не является неожиданным. Действительно, при прохождении молекулярного иона через вещество вследствие страгглинга пробегов среднее расстояние между составляющими его атомами увеличивается. Расчеты по программе TRIM [31, 32] показали, что среднее расстояние между компонентами молекулярного иона N_2^+ на глубине 80 нм (соответствующей максимуму

в распределении упругих потерь энергии) составляет около 35 нм.

Из результатов, приведенных на рис. 2, видно также, что возрастание величины потока приводит к уменьшению эффективности МЭ. Для наибольшего значения плотности потока ионов $\gamma = 1$, т.е. молекулярный эффект отсутствует. Столь сильная экспериментальная зависимость $\gamma(F)$ и ее отсутствие при большой плотности потока ионов говорят, что механизм нелинейных энергетических пиков не играет определяющей роли в случае облучения кремния легкими ионами.

Принципиально иной механизм МЭ для режимов облучения в условиях сильного динамического отжига был недавно предложен в работе [8]. Предложенный авторами механизм базируется не на нелинейных энергетических пиках, а на нелинейных процессах дальнейшей эволюции, когда образование устойчивых дефектов (скорость комплексообразования) зависит от эффективной плотности каскада столкновений. Этот механизм вносит существенный вклад в МЭ, когда время стабилизации дефектной области t_s сопоставимо со средним временным интервалом t_{ov} между возникновением соседних перекрывающихся каскадов столкновений. В этих условиях для простых атомарных ионов экспериментально наблюдается зависимость накопления дефектов от плотности ионного тока. Однако как детально обсуждалось в [33], молекулярный эффект с величиной $\gamma > 1$ может наблюдаться даже при таких условиях, когда плотностная зависимость для атомарных ионов слаба. Это происходит из-за того, что процессы взаимодействия между подвижными дефектами собственного каскада происходят за более короткие времена, чем при взаимодействии дефектов из разных каскадов. Как будет показано ниже, для случаев облучения со слабым плотностным эффектом и эффективностью МЭ $\gamma > 1$ плотностной эффект должен появляться при более высоких величинах потока. Отметим также, что в условиях сильного динамического отжига время t_s на несколько порядков величины больше, чем время образования каскада и его термализации t_g .

Модель

Покажем, что представленные на рис. 1, 2 экспериментальные результаты объяснимы с помощью модели, основанной на нелинейности процессов комплексообразования [34]. Будем считать, что каждый падающий ион создает

каскад с концентрацией простейших дефектов $n^{a,m}$, где индексы a и m показывают, каким ионом (атомарным или молекулярным соответственно) создан каскад. После термализации каскада генерированные дефекты мигрируют и взаимодействуют друг с другом в течение времени стабилизации каскада t_s . За это время часть дефектов рекомбинирует, а часть мигрирует и образует дефектное облако с радиусом, равным эффективной диффузионной длине дефектов L_d . Взаимодействие дефектов приводит к образованию устойчивых комплексов, которые и регистрируются в экспериментах (таких как RBSC и EBSD).

Когда величина потока ионов F настолько мала, что $t_s \ll t_{ov}$, эффективность МЭ имеет максимальное значение и не зависит от F , поскольку к моменту попадания в эту область нового иона процессы стабилизации в ней уже закончились. В крайнем случае очень больших потоков МЭ пропадает, т.е. его эффективность $\gamma \rightarrow 1$ и опять не зависит от F . Действительно, в случае высокой плотности ионного тока каскады многократно перекрываются даже для атомарных ионов. В режиме средних значений F , когда $t_s \sim t_{ov}$, эффективность МЭ $\gamma > 1$ и зависит от F . Качественная картина, иллюстрирующая различные режимы облучения, представлена на рис. 3.

Средний временной интервал между перекрытием каскадов может быть приблизительно оценен как время, за которое площадь, покрытая перекрывающимися каскадами, становится сопоставимой с полной облученной площадью. Следовательно,

$$t_{ov} = \frac{1}{F\pi L_d^2}, \quad F_c = \frac{1}{t_s\pi L_d^2}, \quad (2)$$

где F_c – характерная величина потока, при которой наблюдается зависимость $\gamma(F)$.

Для количественного описания МЭ (и сопоставления результатов с экспериментальными) сделаем следующие дополнительные предположения. Во-первых, будем считать, что после термализации каскад состоит только из изолированных вакансий. Во-вторых, учтем только следующие процессы динамического отжига: а) диффузию вакансий (с коэффициентом диффузии D), б) их рекомбинацию на ненасыщаемых стоках (с постоянной времени τ) и в) образование устойчивых дивакансий с концентрацией n_{2v} (с постоянной скорости реакции α). В-третьих, генерацию дефектов и их

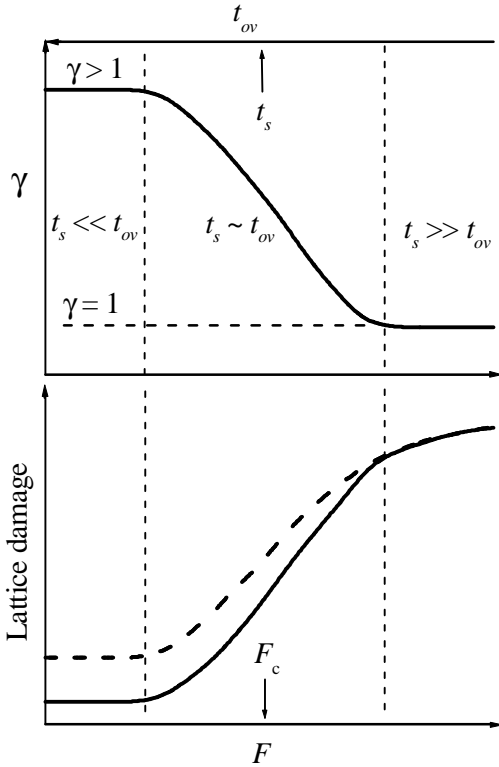


Рис. 3. Схематические зависимости эффективности МЭ (верхний график) и уровня разупорядочения (нижний график) от потока ионов в условиях сильного динамического отжига. На нижнем графике атомарное и молекулярное облучения представлены сплошной и пунктирной линией соответственно

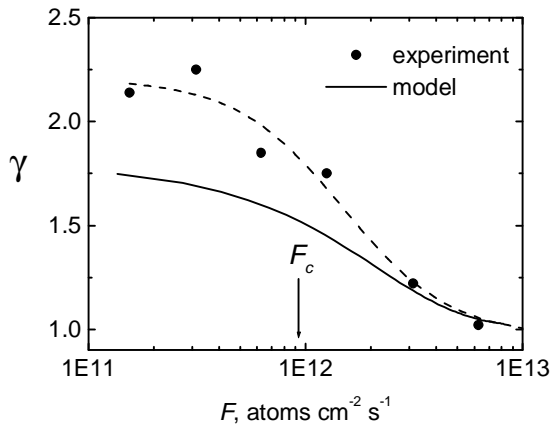


Рис. 4. Зависимость эффективности МЭ от потока ионов (на глубине 30 нм) в Si, облучаемом ионами N_1^+ и N_2^+ с энергией 40 кэВ/атом. Символы (и пунктирная кривая) – эксперимент (усреднение RBSC- и EBSD-результатов); сплошная линия – расчеты

последующую эволюцию будем рассматривать по двум координатам (x и y) в тонком слое толщиной 1 нм и площадью Γ , на глубине z .

Предполагалось, что поперечное распределение генерируемых атомным ионом простейших дефектов является гауссовским. Параметры среднестатистического каскада

столкновений, созданного атомарным ионом N_1^+ с энергией 40 кэВ в рассматриваемом слое (т.е. полное число созданных вакансий g_m и стандартное отклонение s), а также среднее половинное расстояние b между центрами каскадов, созданных компонентами молекулярного иона на глубине z , определялись из статистической обработки результатов программы TRIM [31, 32]². Таким образом, начальная концентрация первичных дефектов (вакансий) в рассматриваемом слое, созданная либо атомным, либо молекулярным ионом, может быть определена как

$$n^a(x, y) = \frac{g_m}{2ps^2} \times \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}{2s^2}\right) \quad (3)$$

$$n^m(x, y) = n^a(x - b \sin b, y - b \cos b) + n^a(x + b \sin b, y + b \cos b),$$

где x_0 и y_0 – координаты точки пересечения траектории атомарного иона с выбранным (на глубине z) слоем и β – угол между осью и прямой линией, проходящей через центры каскадов, образованных компонентами молекулярного иона.

Эволюция первичных дефектов (вакансий) и вторичных (дивакансий) может быть описана следующими уравнениями

$$\frac{\partial n}{\partial t} = d(n^{a,m}, \Delta t) + D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + D \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} - \frac{n}{t} - an^2,$$

$$\frac{\partial n_{2v}}{\partial t} = \frac{1}{2} an^2, \quad (4)$$

где $d(n^{a,m}, \Delta t)$ – функция генерации вакансий. Эта функция описывает случайную генерацию каскадов вакансий (в соответствии с уравнениями (2)) на площади Γ , разделенную во времени интервалом $\Delta t = 1/\Gamma F$. Параметры x_0 , y_0 и β выбирались случайными для каждого иона. Начальные условия $n = 0$ и $n_{2v} = 0$ при $t = 0$. Для уменьшения ошибок, связанных с диффузией дефектов вблизи границ области, налагались циклические граничные условия. Коэффициент диффузии вакансий D был выбран равным $1.7 \times 10^{-9} \text{ см}^2 \cdot \text{с}^{-1}$ (в соответствии с [35, 36]), а единственным подгоночным параметром в расчетах являлась величина L_d (или τ , поскольку $L_d = \sqrt{Dt}$).

² В соответствии с данными работы [32], пороговая энергия смещения атома Si была выбрана равной 13 эВ.

Согласно предлагаемой нами модели, в результате процессов динамического отжига в качестве устойчивых дефектов остаются только дивакансии, которые и дают вклад в наблюдаемое в экспериментах разупорядочение. Следовательно, полное количество дефектов, произведенных атомными или молекулярными ионами (числом k) за время t_{end} , равно

$$A^{am}(k) = \iint_{\Gamma} n_{2v}(t_{\text{end}}) dx dy, \quad (5)$$

а эффективность МЭ может быть записана как

$$\gamma = A^m(k) / A^a(2k). \quad (6)$$

На рис. 4 представлены экспериментальные и расчетные зависимости эффективности МЭ γ от потока ионов F на глубине 30 нм для $L_d \approx \approx 50$ нм (и, следовательно, $\tau \approx 15$ мс). Найденная согласно (2) характерная величина потока (т.е. при $t_s = \tau$) оказалась равной $F_c \approx \approx 9 \times 10^{11}$ атом·см⁻²·с⁻¹. Это значение F_c соответствует середине диапазона величин потока ионов, где зависимость $\gamma(F)$ наиболее сильна (см. рис. 3).

Как видно из рис. 4, предложенная количественная модель адекватно описывает общий ход экспериментально наблюдаемой зависимости $\gamma(F)$ – сильная зависимость для $F \sim F_c$ и участки насыщения для $F \gg F_c$ и $F \ll F_c$. Вместе с тем наблюдается заметное количественное расхождение между экспериментальными и теоретическими результатами. Наблюдаемые различия не являются столь уж неожиданными, поскольку для упрощения расчетов был сделан ряд грубых приближений. В частности, мы рассматривали двумерную диффузию и образование только одного вида устойчивых дефектов, дающих вклад в наблюдаемое в экспериментах разупорядочение (дивакансии). Вместе с тем известно о существовании и других типов стабильных дефектов в кремнии (см., например, [37, 38]). Введение в предложенную нами модель МЭ дополнительных реальных процессов динамического отжига неизбежно увеличит число подгоночных параметров и усложнит расчеты, но должно привести к лучшему согласию теоретических и экспериментальных результатов.

Заключение

Исследовался молекулярный эффект в кремнии, облучаемом при комнатной температуре легкими ионами. Обнаружена сильная зависимость эффективности МЭ от величины потока ионов, одной из особенностей

которой является уменьшение эффективности при возрастании потока. Результаты показывают, что общепринятый механизм молекулярного эффекта, основанный на нелинейных энергетических пиках, не подходит для случая облучения кремния легкими ионами. Наблюдаемые результаты объясняются нелинейными процессами кластеризации дефектов, при которых скорость комплексообразования зависит от эффективной плотности каскада столкновений. (5)

Авторы выражают благодарность Российскому фонду фундаментальных исследований за финансовую поддержку (грант № 06-08-00989).

Работы в Ливерморской национальной лаборатории (США) проводились при содействии U.S. DOE University of California, LLNL (contract No. W-7405-Eng-48).

Список литературы

1. Thompson D.A. // Rad. Eff. – 1981. – V. 56. – P. 105.
2. Davies J.A. In: Ion Implantation and Beam Processing / Ed. by J.S. Williams and J.M. Poate. – Academic Press, 1984. – 388 p.
3. Yamada I., Brown W. L., Norhby J.A., Sosnowski M. // NIM B. – 1993. – V. 79. – P. 223.
4. Sigmund P., Bitensky I.S., Jensen J. // NIM B. – 1996. – V. 112. – P. 1.
5. Ihara S., Itoh S., Kitakami J. // Phys. Rev. B. – 1998. – V. 58. – P. 10736.
6. Titov A.I., Kucheyev S.O. // NIM B. – 1999. – V. 149. – P. 129.
7. Arista N.R. // NIM B. – 2000. – V. 164–165. – P. 108.
8. Kucheyev S.O., Williams J.S., Titov A.I. et al. // Appl. Phys. Lett. – 2001. – V. 78. – P. 2694.
9. Kimura K., Oota Y., Nakajima K. et al. // NIM B. – 2003. – V. 211. – P. 206.
10. Peltola J., Nordlund K. // Phys. Rev. B. – 2003. – V. 68. – P. 035419.
11. Rickman R.D., Verkhoturov S.V., Parilis E.S., Schweikert E.A. // Phys. Rev. Lett. – 2004. – V. 92. – P. 047601.
12. Bounea S., Della Negra S., Jacquet D. et al. // Phys. Rev. B. – 2005. – V. 71. – P. 174110.
13. Titov A.I., Belyakov V.S., Kucheyev S.O. // NIM B. – 2002. – V. 194. – P. 323.
14. Brinkman J.A. // J. Appl. Phys. – 1954. – V. 25. – P. 961.
15. Titov A.I., Kucheyev S.O., Belyakov V.S., Azarov A.Yu. // J. Appl. Phys. – 2001. – V. 90. – P. 3867.
16. Titov A.I., Carter G. // NIM B. – 1996. – V. 119. – P. 491.
17. Schmid K. // Rad. Eff. – 1973. – V. 17. – P. 201.
18. Chu W.K., Mayer J.W., Nicolet M.A. Backscattering spectrometry. – NY: Academic, 1978. – 428 p.

19. Laponsky A.B., Whetten N.R. // *Phys. Rev.* – 1960. – V.120. – P. 801.
20. Coates D.G. // *Phil. Mag.* – 1967. – V. 16. – P. 1179.
21. Hirsh P., Howie A., Nicholson R.B. et al. *Electron Microscopy of Thin Crystals* / Robert E. Huntington. – NY.: Krieger Publishing Co., 1965. – 417 p.
22. Абрян И.А., Титов А.И. // *ФТТ.* – 1968. – Т. 10. – С. 3432.
23. Titov A.I., Belyakov V.S., Azarov A.Yu. // *NIM B.* – 2003. – V. 212. – P. 169.
24. Абрян И.А., Беляков В.С., Титов А.И., Хлебалкин А.В. // В кн.: «Труды 7 международной конференции по атомным столкновениям в твердых телах, Москва, 19–23 сентября 1987 года». – М.: Изд-во МГУ, 1980. Т. 2. – С. 247.
25. Титов А.И., Хлебалкин А.В. // *Письма в ЖТФ.* – 1980. – Т. 6. – С.1052.
26. Титов А.И. Дис... д.ф.-м.н. – Л.: ЛПИ, 1989.
27. Герасименко Н.Н., Двуреченский А.В., Цейтлин Т.М. // *ПТЭ.* – 1972. – Т. 5. – С. 254.
28. Абрян И.А., Никулина Л.М. // *ФТП.* – 1997. – Т. 31. – Вып. 10. – С. 1164.
29. Van den Berg J.A., Armour D.G., Zhang S. et al. // *J. Vac. Sci. Technol. B.* – 2002. – V. 20. – P. 974.
30. Азаров А.Ю. // *ФТП.* – 2004. – Т. 38. – Вып. 12. – С. 1445.
31. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. *The Stopping and Range of Ions in Solids.* – NY: Pergamon, 1985. – 112 p.
32. Loferski J.J., Rappaport P. // *Phys. Rev.* – 1958. – V. 111. – P. 432.

33. Kucheyev S.O., Williams J.S., Jagadish C. et al. et al. // Phys. Rev. B. – 2001. – V. 63. – P. 224112.
// Phys. Rev. B. – 2001. – B 64. – P. 035202.
34. Titov A.I., Azarov A.Yu., Nikulina L.M., Kucheyev S.O. // Phys. Rev. B. – 2006. – V. 73. – P. 064111.
35. Titov A.I., Kucheyev S.O. // NIM B. – 2000. – V. 168. – P. 375.
36. Oehrlein G.S., Krafczik I., Lindstrom J.L. et al. // J. Appl. Phys. – 1983. – V. 54. – P. 179.
37. Corbett J.W., Karins J.P., Tan T.Y. // NIM. – 1981. – V. 182/183. – P. 457.
38. Amarendra G., Rajaraman R., Venugopal Rao G.

MOLECULAR EFFECT IN Si BOMBARDED BY LIGHT IONS: A MECHANISM

A.I. Titov, A.Yu. Azarov, L.M. Nikulina, S.O. Kucheyev

By using the Rutherford backscattering/channeling spectroscopy and a technique based on anisotropy of inelastic electron backscattering, we study the molecular effect in Si bombarded at room temperature by 40 keV/atom N_1^+ and N_2^+ ions with ion flux density ranging from 1.5×10^{11} to 6.2×10^{12} at/(cm² s). The value of the molecular-effect efficiency decreases with increasing ion flux density and, for the highest value, no molecular effect is observed. This result indicates that the conventional mechanism of the molecular effect, based on the concept of the nonlinear-collision subcascade overlapping, is not suitable for the case of light-ion irradiation of Si. A mechanism based on the dependence of secondary stable-defect formation on the density of generated collision cascades is developed to explain the phenomenon. Computer simulations show that this mechanism explains, at least qualitatively, the experimental results.