

直接法—多次矩法联合计算高能离子注入化合物靶损伤分布

江炳尧 杨根庆 邹世昌

(中国科学院上海冶金研究所离子束开放实验室, 上海, 200050)

1991年1月25日收到, 同年4月26日修改定稿

高能注入离子在固体中的损伤分布一般采用直接法计算。但是在化合物靶的情况下, 各类靶反冲原子所沉积的损伤能及其分布矩难以正确估算, 直接影响直接法的运用。本文引入多次矩法予以解决, 取得了良好的效果。

PACC: 6180

一、引言

高能注入离子在固体中的损伤分布除了极少数情况之外, 一般都显著地偏离高斯分布。若用多次矩方法^[1]求解, 要得到较精确的损伤分布需要计算高次矩, 不仅计算复杂而且误差大, 所以一般采用直接法^[2]计算。但是在化合物靶的情况下, 各类靶反冲原子所沉积的损伤能及其分布矩难以正确估算, 限制了直接法的运用。但是这个困难却很容易用多次矩法予以解决。由于直接法不需要十分精确的靶反冲原子的损伤分布, 用多次矩法解出二个低次矩已经足够。所以本文的算法实际上是综合了直接法和多次矩法各自的优点。

二、直接法

当一束初始能量为 E 的离子入射某固体靶, 由于与靶原子的相互作用, 注入离子不断地被散射并失去能量。设某一时刻注入离子的能量降至 E' , 离子在靶中的深度分布函数为 $P(E, E', x)$ 。

在靶深 x 处离子把能量传递给靶原子, 若靶原子获得足够大的动能将克服移位阈能作反冲运动与其它靶原子碰撞。这样离子沉积的能量并不是完全集中在 x 处, 而是分布在 $(x - x')$ 的范围内。令函数 $D(E', x - x')$ 表示这种分布。于是离子处于中间态能量 E' 时沉积损伤能的归一化深度分布函数为:

$$S(E, E', x) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(E, E', x) D(E', x - x') dx'. \quad (2.1)$$

离子在中间态能量 E' 时所沉积的损伤能为各类靶反冲原子沉积的损伤能的总和:

$$\Psi(E') = \sum N_i \int_0^{\tau_i E'} \nu_i(T) d\sigma_i(E', T), \quad (2.2)$$

式中 N_i 为靶中第 i 种靶原子的原子密度, $\nu_i(T)$ 为第 i 种靶原子与注入离子碰撞后作反冲运动所沉积的损伤能, T 为该反冲原子的初始能量, $d\sigma_i(E', T)$ 为微分散射截面^[3,4], $\tau_i = 4M_1 M_i / (M_1 + M_i)^2$, M_1, M_i 分别为注入离子和第 i 种靶原子的质量。

在 dR 的路程上离子沉积的损伤能为 $\Psi(E')dR$, 注入离子经历了各个中间态能量后在靶深 x 处沉积损伤能的总和为:

$$Q(E, x) = \int_0^x S(E, E', x) \Psi(E') \left(\frac{dR}{dE'} \right) dE', \quad (2.3)$$

式中:

$$\left(\frac{dR}{dE'} \right)^{-1} = \sum N_i [S_n^i(E') + S_e^i(E')],$$

$$S_n^i(E') = \int_0^{\tau_i E'} T d\sigma_i(E', T).$$

其中 $S_n^i(E')$, $S_e^i(E')$ 分别为核阻止本领和电子阻止本领^[5]。

三、多次矩法计算靶反冲原子沉积的损伤能及其分布矩

在 2.2 式中靶反冲原子沉积的损伤能 $\nu_i(T)$ 及其分布矩是未知函数, 采用多次矩法计算。

定义 $H_i(E)$ 为第 i 种靶原子获得初始能量 E 后作反冲运动时所沉积的离化能。若靶材料由 L 种元素构成, 可得 L 阶联立方程^[6]:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^L N_i S_e^{i,j}(E) &= \frac{dH_j(E)}{dE} \sum_{i=1}^L N_i S_e^{i,j}(E) \\ &+ \sum_{i=1}^L N_i \int_0^{\tau_i E} \{H_i(E) - H_i(E-T) - H_i(T)\} d\sigma_{i,i}(E, T) \quad (3.1) \\ &(j = 1, 2, \dots, L). \end{aligned}$$

各类靶反冲原子沉积的离化能 $H_i(E)$ 求得后, 各类靶反冲原子沉积的损伤能近似为:

$$\nu_i(E) \approx E - H_i(E) \quad (i = 1, 2, \dots, L). \quad (3.2)$$

靶反冲原子在其初始运动方向沉积损伤能的分布矩可由下述微分一积分方程算得:

$$\begin{aligned} G_{n,l}^i(E) &= \frac{dm_{n,l}^i(E)}{dE} \sum_{i=1}^L N_i S_e^{i,j}(E) + \sum_{i=1}^L N_i \int_0^{\tau_i E} \{m_{n,l}^i(E) \\ &- m_{n,l}^i(E-T) P_l[\cos \theta_{i,i}(E, T)] \\ &- m_{n,l}^i(T) P_l[\cos \theta_{i,i}(E, T)]\} d\sigma_{i,i}(E, T) \quad (3.3) \\ &(j = 1, 2, \dots, L), \end{aligned}$$

式中

$$\begin{aligned} G_{n,l}^i(E) &= -\frac{1}{2l+1} [(l+1)(l-n)m_{n-1,l+1}^i(E) \\ &- l(l+n+1)m_{n-1,l-1}^i(E)], \end{aligned}$$

$$\cos \theta_{i,i}(E, T) = \sqrt{1 - T/E} + \frac{1 - \mu_{i,i}}{2} \frac{T/E}{\sqrt{1 - T/E}},$$

$$\cos \bar{\theta}_{i,i}(E, T) = \frac{\sqrt{T/E}}{\sqrt{\gamma_{i,i}}},$$

$$\mu_{i,i} = \frac{M_i}{M_j}; \quad \gamma_{i,i} = \frac{4M_i M_j}{(M_i + M_j)^2},$$

$P_l[x]$ 为勒让德函数。

凡满足条件 $(l + n)$ 为偶数，以及 $l \leq n$ 时方程有非零解。计算到二阶矩， $G_{n,l}(E)$ 取值如表 1 所示。

$m_{0,0}(E)$ 为反冲原子在靶中沉积的损伤能，

$$m_{0,0}(E) = v(E).$$

表 1

n	l	$G_{n,l}(E)$
1	1	$m_{0,0}(E)$
2	0	$2m_{1,1}(E)$
2	2	$2m_{1,1}(E)$

靶反冲原子损伤分布的统计参数与矩 $m_{n,l}(E)$ 的关系表示如下：

$$\text{平均深度: } D_p = m_{1,1}(E)/m_{0,0}(E),$$

$$\text{均方差: } \Delta D_p = \left\{ \frac{1}{3} [m_{0,2}(E) + 2m_{2,2}(E)]/m_{0,0}(E) - [m_{1,1}(E)/m_{0,0}(E)]^2 \right\}^{1/2},$$

$$\text{横向宽度: } \Delta D_t = \left\{ \frac{2}{3} [m_{2,0}(E) - m_{2,2}(E)]/m_{0,0}(E) \right\}^{1/2}.$$

四、解 S 函数和 D 函数的矩方法

由于注入离子在中间态能量时沉积的损伤能 $\Psi(E')$ 是一个变化缓慢的函数， $S(E, E', x)$ 相对于总的损伤分布 $Q(E, x)$ 是一个分布较窄的函数，因此为了确定 $Q(E, x)$ 并不需要函数 $S(E, E', x)$ 十分精确的表达式。同样靶反冲原子的损伤分布，除了在能量较低的情况下，相对于离子中间态分布 $P(E, E', x)$ 也是一个分布较窄的函数。因此为了确定 $S(E, E', x)$ 也不需要十分精确的 $D(E', x - x')$ 。若假定 S、D 都服从高斯分布对于最终的计算结果不会带来严重的误差。

$$\begin{aligned} \text{定义: } M_{n,p}(E, E') &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^n P(E, E', x) dx, \\ M_{n,D}(E') &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^n D(E', x) dx, \\ M_{n,S}(E, E') &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^n S(E, E', x) dx, \\ M_{n,Q}(E) &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^n Q(E, x) dx. \end{aligned} \tag{4.1}$$

由(2.1),(4.1)式可得:

$$M_{n,S}(E, E') = \sum_{k=0}^n C_{n,k} M_{k,p}(E, E') M_{n-k,D}(E') \tag{4.2}$$

式中 $C_{n,k}$ 为二项式的系数。

由于函数 $D(E', x)$ 为各类靶反冲原子损伤分布的迭加, 其分布矩 $M_{n,D}(E')$ 只能通过对微分散射截面积分取平均得到:

$$M_{n,D}(E') = \sum N_i \int_{T=0}^{r_i E'} \bar{M}_{n,\varrho}^i(T, \eta) \nu_i(T) d\sigma_i(E', T) / \sum N_i \int_{T=0}^{r_i E'} \nu_i(T) d\sigma_i(E', T) \quad (4.3)$$

式中 T 是反冲原子的初始能量, η 是反冲原子的初始运动方向与靶表面法线方向的余弦。 $\bar{M}_{n,\varrho}^i(T, \eta)$ 为第 i 种反冲原子沿 η 方向的损伤分布的矩, 并近似认为有如下简单关系:

$$\begin{aligned} \bar{M}_{1,\varrho}^i(T, \eta) &= \eta M_{1,\varrho}^i(T, 1) = \eta D_p(T), \\ \bar{M}_{2,\varrho}^i(T, \eta) &= [\eta \bar{M}_{2,\varrho}^i(T, 1)]^2 + (1 - \eta^2) \bar{M}_{2,\varrho}^i(T, 1), \\ &= [\eta \Delta D_p(T)]^2 + [\eta D_p(T)]^2 + (1 - \eta^2)[\Delta D_p(T)]^2. \end{aligned} \quad (4.4)$$

五、实验结果与讨论

实验分别为室温下 400 keV Mg^+ 离子注入 GaAs 单晶, 剂量为 $5 \times 10^{14}/cm^2$ 和 50 keV H^+ 离子注入 $LiNbO_3$ 单晶, 剂量为 $3 \times 10^{16}/cm^2$ 。为了尽量减小退火效应, 束流密度比较小, 延长注入的时间使靶温不至升得太高。

实验样品用 2MeV 的 He^+ 离子作沟道背散射分析, 测得的损伤谱按 J. F. Ziegler 的方法^[7]换算成损伤分布。

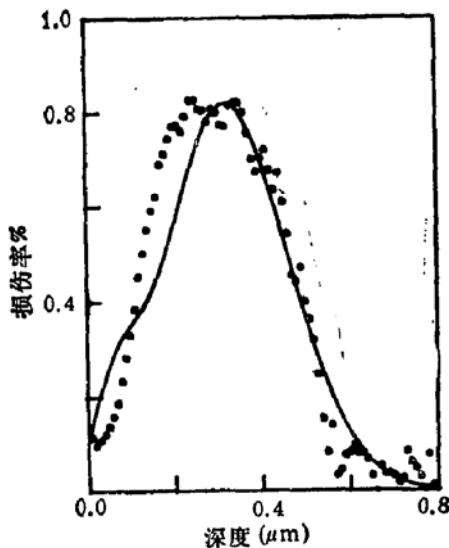


图 1 400keV Mg^+ 离子注入 GaAs 单晶,
剂量为 $5 \times 10^{14}/cm^2$

● 实验值 — 理论值

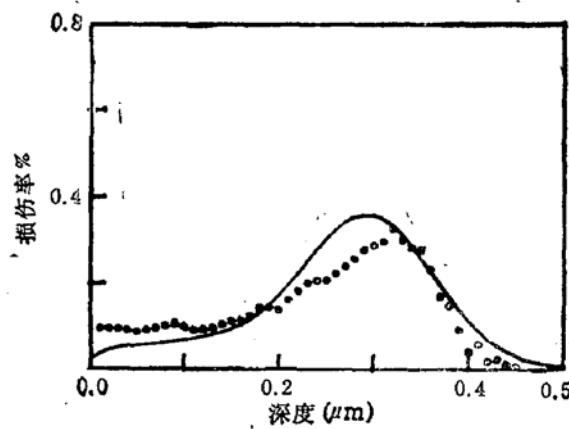


图 2 50keV H^+ 离子注入 $LiNbO_3$ 单晶,
剂量为 $3 \times 10^{16}/cm^2$

● 实验值 — 理论值

本文算得的能量沉积分布按 Kirchen-Peace 模型^[8,9]换算成损伤分布。理论值与实验值的比较如图 1、图 2 所示。

表 1 400keV Mg^+ 注入 GaAs

	本 文	多次矩法
D_p	$0.31570\mu\text{Å}$	$0.30506\mu\text{Å}$
ΔD_p	$0.14547\mu\text{Å}$	$0.14967\mu\text{Å}$
$\nu(E)/E$	0.279587	0.26929

表 2 50keV H^+ 注入 $LiNbO_3$

	本 文	多次矩法
D_p	$0.26603\mu\text{Å}$	$0.27911\mu\text{Å}$
ΔD_p	$0.09489\mu\text{Å}$	$0.10304\mu\text{Å}$
$\nu(E)/E$	0.014968	0.01349

由于 Mg^+ 离子质量较大, 每个质量单位的能量约为 $16\text{keV}/\text{amu}$ 偏低, 因此损伤分布接近高斯分布。而 H^+ 离子质量较小, 每个质量单位的能量约为 $50\text{keV}/\text{amu}$ 较高, 损伤分布显著地偏离高斯分布。

由于采用多次矩法计算反冲原子沉积的损伤能及其分布矩, 数值比较正确, 改善了直接法的精确度。本文算得的损伤分布的统计参数与多次矩法算得的结果相当接近, 见表 1、表 2。

致谢: 蒋新元、邵天浩两位同志提供了实验数据, 在此表示感谢。

参 考 文 献

- [1] K. B. Winterbon, *Ion Implantation Range and Energy Deposition Distributions*, Vol. 2, Plenum Press, London (1975).
- [2] D. K. Brice, *Ion Implantation Range and Energy Deposition Distributions*, Vol. 1, Plenum Press, London (1975).
- [3] J. Lindhard, V. Nielsen and M. Scharff, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, 36, 10(1968).
- [4] K. B. Winterbon, P. Sigmund and J. B. Sanders, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, 37, 14(1970).
- [5] J. F. Ziegler, J. P. Biersack and U. Littmark, *The Stopping and Range of Ions in Solids*, 66, Pergamon Press, New York (1985).
- [6] Jiang Bingyao and Dai Renzi, *Vacuum*, 39, 331(1989).
- [7] J. F. Ziegler, *J. Appl. Phys.*, 43, 2973(1972)
- [8] G. H. Kinchin, and R. S. Pease, *Rep. Prog. phys.*, 18, 1(1955).
- [9] G. H. Kinchin, and R. S. Pease, *J. nucl. Energy*, 1, 200(1955).

Damage Distribution in Compound Materials Induced by High Energy Ion Implantation

Jiang Bingyao, Yang Genqing and Zou Shichang

(Ion Beam Laboratory, Shanghai Institute of Metallurgy, Academia Sinica, Shanghai, 200050)

Abstract

The multi-order moments method is employed to evaluate the moments of the recoil atom damage distribution. It improves the accuracy of the direct method especially in the compound target conditions. The results calculated are quite close to those of the experimental measurements.

PACC: 6180