

连续模型多弦热平均势计算 沟道产额角分布

江炳尧 张祖华* 周祖尧 杨根庆 邹世昌

(中国科学院上海冶金研究所)

1985年11月9日收到

本文用连续近似和半路平面模型两种近似，在考虑多根原子弦的条件下（多弦近似），计算了沟道产额角分布。在计算横向能量 E_{\perp} 与可进入区面积 $A(E_{\perp})$ 的关系曲线时，本文用随机投点的方法替代 K. Sato 等人的划格子的方法，以提高计算的适应性。对于 1 MeV He 离子入射 $\text{Si}\langle 110 \rangle$ 沟道，本文用半路平面模型和多弦热平均势算得 $\psi_{1/2}$ 为 0.81° ，这个结果比 S. T. Picraux 等人用单弦静态势算得的值 0.89° 更为接近实验值 (0.75°)。本文对 $\psi_{1/2}$ 和 χ_{\min} 的理论值与实验值的差别以及改进理论计算的可能方法作了讨论。

一、引言

沟道效应技术被广泛地用来测定金属和半导体材料中杂质原子的晶格位置^[1]。通常单凭实验测得的沟道产额角分布的半宽度，或者，在 ZnS 型晶体中，根据近 $\langle 110 \rangle$ 方向的沟道产额的不对称行为^[2]，就可以得出替位杂质原子的定位结论。但是，近替位、间隙位和多重位（Multiple sites）等晶格位的确定，则常常需要借助理论计算的沟道产额角分布与实验结果的拟合才能实现^[3,4]。计算沟道产额角分布的理论方法主要有两种。一种是 Lindhard 的连续模型^[5]，另一种是以两体碰撞为基础的 Monte Carlo 计算机模拟^[6]。虽然，一般而言 Monte Carlo 计算机模拟的结果优于连续模型。可是，它的计算量相当大。本文只采用连续模型计算。

连续模型包括两种近似方法：连续近似（continuum approximation）和半路平面模型（half way plane model）。在早期的计算沟道产额角分布的文章中，一般只考虑单根原子弦^[3,7,8]，近年来的文章中，大多考虑多根原子弦（多弦近似）。K. Sato 等人^[9]曾经用多弦热平均势计算过 NbO 晶体的沟道产额角分布，在计算中他们把沟道横截面划成一定形状的格子。由于不同晶格以及不同晶向的沟道横截面的形状可能不同，要划分成等面积的小格子有一定的复杂性。此外，K. Sato 等人^[9]仅用连续近似作了计算。他们在文章中对计算程序也未作充分介绍。本文用连续近似和半路平面两种方法，考虑多根原子弦，计算了沟道产额角分布。本文在计算可进入区面积与横向能量的关系时，采用随机投点的方法替代 K. Sato 等人的划格子方法，提高了计算的精确度和程序的适应性。

* 上海市嘉定南门，上海科学技术大学

二、物理模型和计算方法

下面分别介绍连续近似和半路平面模型及其计算方法。

1. 连续近似

设探针束 (Z_1) 入射某单晶靶 (Z_2) 与一个低指数轴(例如 $\langle 110 \rangle$ 轴) 成 ϕ 角。若只考虑单根原子弦，则在 r_{in} 点穿透表面的探针粒子的横向能量为：

$$E_\perp = E\phi^2 + U_T(r_{in}), \quad (1)$$

其中： E 是探针粒子的入射能量； $U_T(r)$ 是沟道热平均势：

$$U_T(r) = \int dP(r')U(r - r'), \quad (2)$$

式中： $dP(r)$ 为晶格原子的热振动位移几率：

$$dP(r) = \alpha \exp(-r^2/\rho^2)dr^2/\rho^3, \quad (3)$$

其中： ρ 为二维热振动振幅的均方根值， α 为常数，在归一化产额时， α 将被消去。 $U(r)$ 为静态沟道连续势，本文采用 Lindhard 的标准连续势^[3]：

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d} \ln \left(1 + \frac{c^2 a^2}{r^2} \right), \quad (4)$$

其中： $c \approx \sqrt{3}$ ； $a = 0.8853 a_0 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}$ 为屏蔽长度。
(4) 式的势能零点在无穷远处。在多弦近似下，取沟道的几何中心点 r_0 为势能的零点。
(4) 式右边应减去 $U(r_0)$ 。

若考虑多根原子弦的作用，(1) 式中的 $U_T(r_{in})$ 应取多弦热平均势 $U_T''(r_{in})$ ：

$$U_T''(r_{in}) = \sum_{i=1}^m U_{T,i}(r_i - r_{in}), \quad (5)$$

其中： r_{in} 和 r_i 分别是入射点和第 i 根原子弦的矢径。探针粒子进入沟道并达到统计平衡后，横向能量为 E_\perp 的粒子的空间密度 $f(E_\perp, r)$ 是可进入区面积 $A(E_\perp)$ 的倒数。按随机归一后， $f(E_\perp, r) = A_0/A(E_\perp)$ ，其中 A_0 是沟道的横截面面积。用均匀随机投点的方法获得一系列势能值，每一势能值近似地代表一小块区域内势能的平均值。把势能值按大小依次排列，可算得横向能量 E_\perp 与相应的可进入区面积 $A(E_\perp)$ 的关系曲线。沟道横向平面 r 处的粒子通量 $F(r)$ 为：

$$F(r) = \int f(E_\perp, r) g(E_\perp) dE_\perp, \quad (6)$$

其中： $g(E)$ 为穿透因子，即入射粒子取得横向能量 E_\perp 的几率：

$$g(E) = \frac{1}{A_0} \int d^2r \cdot \delta [E_\perp - E\phi^2 - U_T(r)], \quad (7)$$

式中：
 $d^2r = r dr \sin\theta d\theta$ 。

在 r 处，沟道粒子与晶格原子的近距相互作用的几率为 $F(r) dP(r)$ ，总产额由 $F(r) dP(r)$ 积分得出：

$$\chi(\phi) = \int F(r) dP(r) = \int F(r) \exp(-r^2/\rho^2) dr^2/\rho^3, \quad (8)$$

积分区域为 A_0 , $\chi(\phi)$ 为连续近似下的沟道产额角分布。

2. 半路平面模型

根据 Lindhard 的倒逆原理^[3], 在晶体的近表面区, 阻塞产额角分布与沟道产额角分布相同, 因此采用半路平面模型用发射几何(图 1)计算阻塞产额角分布。

设杂质原子偏离原子列的平衡位置的距离为 x_0 , 它的热振动位移几率为:

$$dP(r', \theta') = \alpha \cdot \exp(-r'^2/\rho^2) \times \frac{d(r'^2)}{\rho^2} d\theta', \quad (9)$$

式中: $\alpha \approx 1$, 某一瞬间处于 (r', θ') 的杂质原子可合理地假定为各向同性地发射粒子(小角度近似). 发射用球坐标描述, 以发射体为中心. 被发射的粒子 A 与半路平面相交于 P 点, 它的横向能量由发射角 ϕ 和半路平面上的势能 $U(r^*)$ 决定:

$$E_{\perp} = E\phi^2 + U_T(r^*) \quad (10)$$

其中: E_{\perp} 为粒子 A 的横向能量; $U_T(r^*)$ 为单弦热平均势. r^* 由参量 r' 、 θ' 、 x_0 、 θ 和 ϕ 决定:

令 P 点的坐标为 (x, y) ,

$$\begin{aligned} x &= x_0 + r' \cos \theta' + \frac{d}{2} \operatorname{tg} \phi \sin \theta; \\ y &= r' \sin \theta' + \frac{d}{2} \operatorname{tg} \phi \cos \theta; \\ r^* &= (x^2 + y^2)^{1/2} \end{aligned} \quad (11)$$

式中: d 为原子列上的原子间距.

若考虑多根原子弦的作用, (10) 式中 $U_T(r^*)$ 应改为多弦热平均势 $U_T''(r)$:

$$U_T''(r) = \sum_{i=1}^m U_{T_i}(r_i) \quad (12)$$

式中: r 表示 P 点的坐标; r_i 为 P 点到邻近第 i 根弦的垂直距离.

显然, 被发射的粒子取得某一横向能量 E_{\perp} 的几率 $\pi(E_{\perp})$ 可以表示为:

$$\pi(E_{\perp}) = \int_0^{r_0} \int_0^{2\pi} dP(r', \theta') \int d(E\phi^2) \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \delta[E_{\perp} - E\phi^2 - U_T''(r)], \quad (13)$$

其中: $r_0 = (\pi N d)^{-1/2}$ 为单弦等效圆的半径; 式中 N 为晶格原子密度. 计算 $\pi(E_{\perp})$ 的方法参照 Andersen 的单弦近似下的数值计算方法^[7]. 取 $U_T''(r) = 0$ 对应的 $\pi(E_{\perp})$ 为随机值进行归一. 计算得到的 $\pi(E_{\perp}) \sim E_{\perp}$ 曲线供计算阻塞产额角分布时内插用. 设被发射的粒子在到达晶体表面时已达到统计平衡. 此时横向张量为 E_{\perp} 的粒子被局限于可进入区 $A(E_{\perp})$ 内. 在 $A(E_{\perp})$ 内不同地点出射的粒子, 它的出射角是不同的. 显然, 出射粒子取得某出射角 ϕ_s 的几率可表示为:

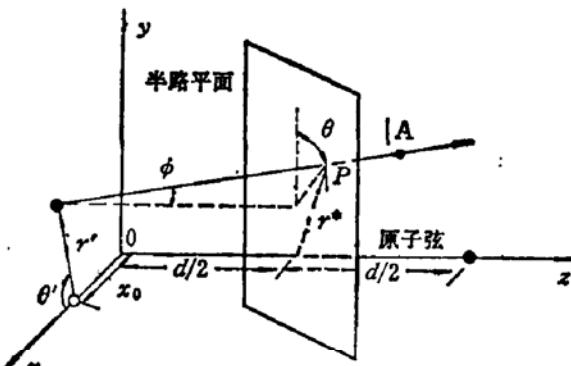


图 1 发射几何. 杂质原子的平衡位移为 x_0 , 在某一瞬间振动到 (r', θ') , 被发射的粒子 A 与半路平面相交于 P 点.

$$T(E_\perp, E\phi_e^2) = \frac{1}{A(E_\perp)} \int_{A(E_\perp)} d^2r \delta[E_\perp - E\phi_e^2 - U_T^m(r)], \quad (14)$$

式中: $T(E_\perp, E\phi_e^2)$ 为出射穿透因子。不同横向能量的粒子都可能以 ϕ_e 角出射, 所以以 ϕ_e 角出射粒子的总数即由积分得出:

$$\chi(E\phi_e^2) = \int \pi(E_\perp) T(E_\perp, E\phi_e^2) dE_\perp = \int_{A_0} \frac{\pi(E\phi_e^2 + U_T^m(r)) dA}{A(E\phi_e^2 + U_T^m(r))}, \quad (15)$$

式中: $\chi(E\phi_e^2)$ 为阻塞产额角分布。取 $\phi_e = 5\phi_1$ 的 $\chi(E\phi_e^2)$ 为随机值对阻塞产额进行归一。式中 ϕ_1 :

$$\phi_1 = \left(\frac{2Z_1 Z_2 e^2}{Ed} \right)^{1/2} \text{ 为沟道特征角。}$$

图 2 所示为用半路平面模型算得的替位和近替位原子的沟道产额角分布。

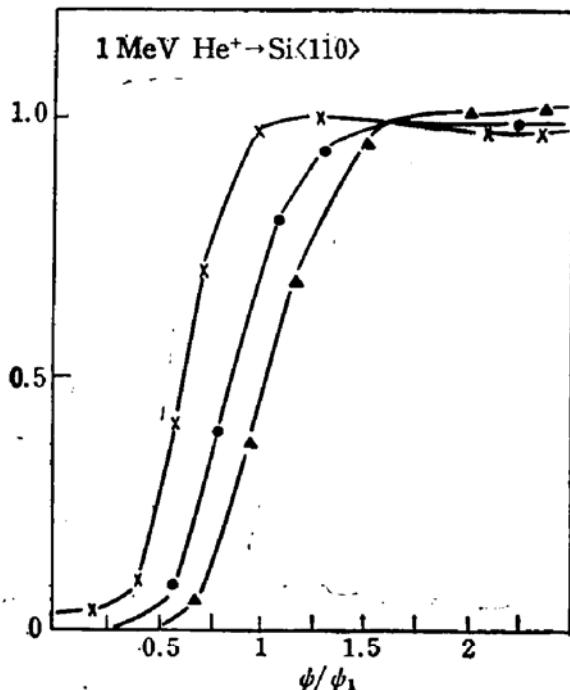


图 2 用半路平面模型算得的替位和近替位原子沟道产额角分布(6弦热平均势)

▲ $x_0 = 0$ ● $x_0 = 0.1 \text{ \AA}$ × $x_0 = 0.2 \text{ \AA}$

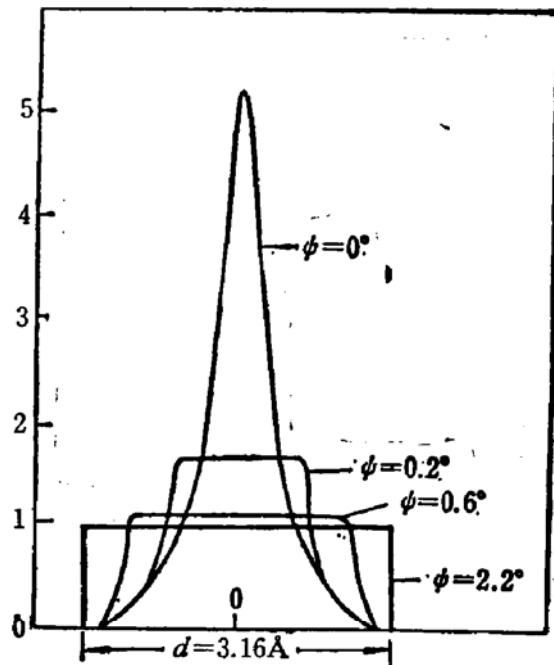


图 3 400 keV 质子在 $W<100>$ 沟道中沿对角线的通量分布

三、结果与讨论

1. 通量成峰效应 (flux peaking)

图 3 所示是连续近似下用四弦热平均势算得的 400 keV 质子在 $W<100>$ 沟道中沿对角线的通量分布。由图 3 可见, 当入射束基本上对准沟道时 ($\phi \approx 0^\circ$), 入射粒子便集中在沟道的中心区, 此即所谓的通量成峰效应。

2. 连续近似与半路平面模型计算结果的比较

对于 400 keV 质子入射 $W<100>$ 沟道(低能情况, $\phi_1 > a/d$), 用连续近似和半路平

面模型两种方法计算了替位原子的沟道坑。(替位或近替位原子的沟道产额角分布俗称沟道坑)。结果,连续近似算得的沟道坑半宽度($\phi_{1/2}$)比半路平面模型计算的约大5% (图4 a), 表1。

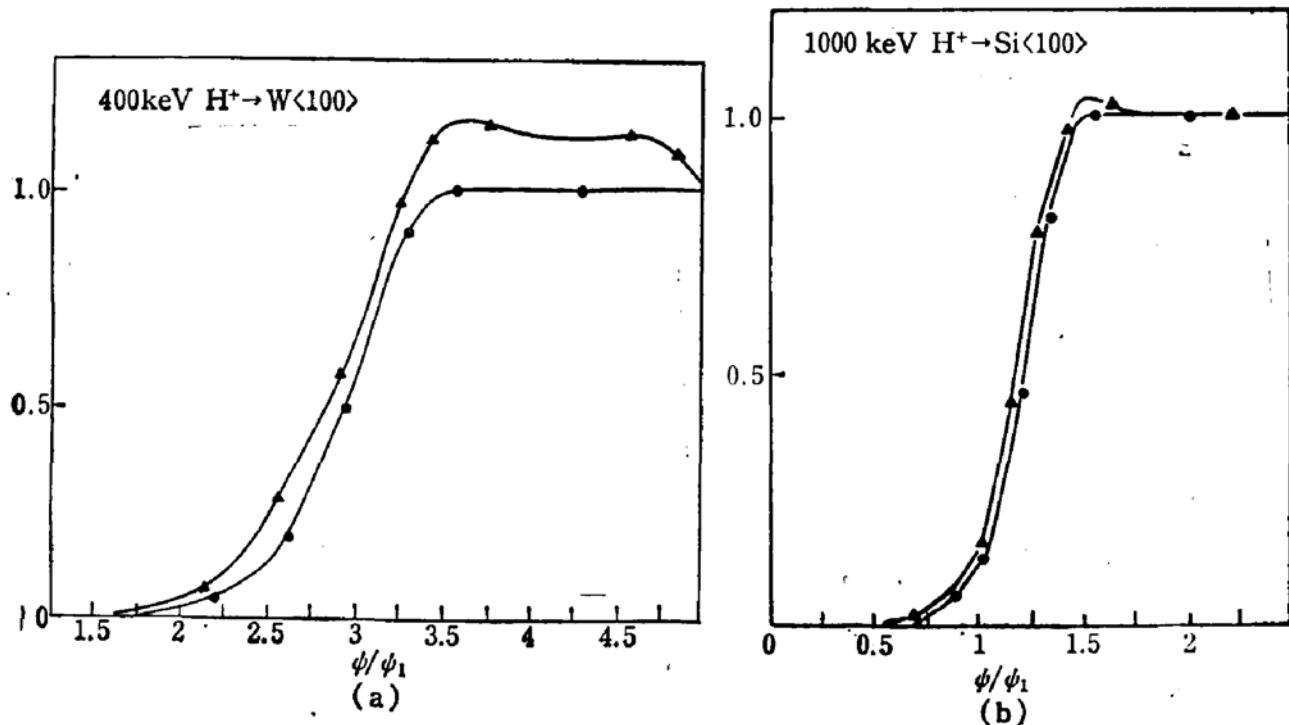


图4 连续近似与半路平面的比较 (a) 低能情况, $\phi_1 > a/d$ (b) 高能情况, $\phi_1 < a/d$
● 连续近似 ▲ 半路平面

表1 400keV $H^+ \rightarrow W<100>$

| | χ_{\min} | $\phi_{1/2}$ |
|------|---------------|--------------|
| 连续近似 | 0.00377 | 2.3662° |
| 半路平面 | 0.00406 | 2.2621° |
| 修正值 | 0.01415 | |
| 实验值 | 0.01200 | 2.1900° |

表2 1000keV $H^+ \rightarrow Si<100>$

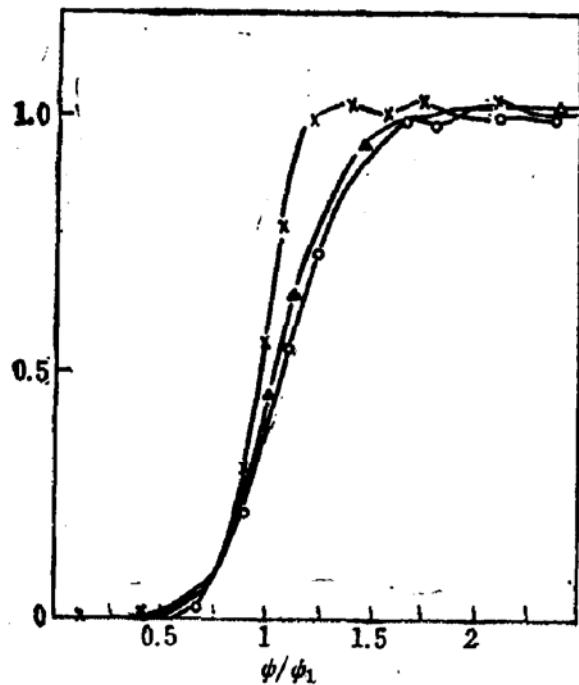
| | χ_{\min} | $\phi_{1/2}$ |
|------|---------------|--------------|
| 连续近似 | 0.009859 | 0.4905° |
| 半路平面 | 0.010000 | 0.4878° |
| 修正值 | 0.03092 | 0.4443° |
| 实验值 | 0.03996 | 0.4459° |

对于1000 keV质子入射Si<100>沟道(高能情况, $\phi_1 < a/d$)时, 两种方法计算给出的沟道坑除了肩头外基本重合(图4 b), 表2。这些计算结果与J. U. Andersen等人的结果一致。他们指出^[3], 在高能情况下, 两种方法计算的结果是一致的, 但是在低能情况下, 半路平面模型的计算结果更为合理。

3. 与 Picraux 等人的计算结果的比较

Picraux等人曾经用半路平面模型在单弦静态势的条件下计算1 MeV He离子入射Si<110>沟道的沟道坑。他们算得的沟道坑半宽度 $\phi_{1/2} = 0.89^\circ$ ^[3]。这个结果与实验值 0.75° ^[6] 相差甚远。但是本文用6弦静态势和6弦热平均势分别算得 $\phi_{1/2} = 0.87^\circ$ 和 $\phi_{1/2} = 0.81^\circ$ (参看图5和表3)。可见, 用6弦热平均势算得的结果已相当接近实验值。这说明多弦热平均势比单弦势合理得多。

4. 关于 χ_{\min} 的讨论

图 5 1 MeV $\text{He}^+ \rightarrow \text{Si}\langle 110 \rangle$ 半路平面模型的计算结果

● 单弦静态势 ▲ 6 弦静态势 × 6 弦热平均势

表 3 1 MeV $\text{He}^+ \rightarrow \text{Si}\langle 110 \rangle$

| | χ_{\min} | $\phi_{1/2}$ (本文) | $\phi_{1/2}$ (P) |
|---------|---------------|-------------------|------------------|
| 单弦静态势 | 0.00690 | 0.90° | 0.89° |
| 6 弦静态势 | 0.00741 | 0.87° | |
| 6 弦热平均势 | 0.00765 | 0.81° | |
| 修正值 | 0.02231 | 0.73° | |
| 实验值 | 0.02863 | 0.75° | |

注: P 为 Picraux 计算值

若考虑单根原子弦，连续近似的最低产额：

$$\begin{aligned} \chi_{\min}^c &= \int_0^{r_0} \frac{dr}{r_0^2 - r^2} \int_0^r dP(r) \\ &\approx \frac{\rho^3}{r_0^2} - \pi N d \rho^3, \end{aligned} \quad (16)$$

半路平面模型的最低产额：

$$\begin{aligned} \chi_{\min}^H &= \int_0^{r_0} \frac{dr}{r_0^2 - r^2} \int_0^r dP(r') \int_0^{\phi_1} \frac{d\phi}{\phi_1^2} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \delta[E_\perp - E\phi^2 - U(r^*)] \\ &\approx \frac{1}{r_0^2} \left(\rho^3 + \frac{(d\phi_1)^2}{8} \right) - \pi N d \left(\rho^3 + \frac{(d\phi_1)^2}{8} \right) \end{aligned} \quad (17)$$

其中：

$$r^* = r^2 + \left(\frac{d\phi}{2} \right)^2 - r' d\phi \cos \theta; \quad E_\perp = U(r).$$

当 $\rho > d\phi_1$ 时，半路平面模型的 χ_{\min} 与连续近似的 χ_{\min} 实际上是一致的。由表 1、2 可见在多弦热平均势的情况下， χ_{\min}^H 与 χ_{\min}^c 仍是相当接近的。

从 (16)、(17) 式可见，连续模型预言 χ_{\min} 与探针粒子的入射能量无关。但是计算机模拟和更细致的实验都表明 χ_{\min} 与粒子的入射能量有关，但关系微弱。

(16)、(17) 式给出的 $\chi_{\min} \approx 1\%$ ，记为 χ_1 。由表 1、2、3 可见，用多弦热平均势算得的 χ_{\min} 远低于实验值。因此需要考虑其它因素的影响。

Lindhard 认为¹⁴，入射束中那些相对原子弦的瞄准距离 $\approx a$ 的粒子，将获得横向能量 $\approx E\phi_1^2$ ，这些粒子经过几次散射，就会与晶格原子碰撞，而给出近距相互作用产额。用 χ_2 表示这种产额，在低能条件下：

$$\chi_2 \approx \pi N d^2 a \phi_1; \quad (\phi_1 > a/d) \quad (18)$$

在高能条件下：

$$\chi_2 \approx \pi N d a^2; \quad (\phi_1 < a/d) \quad (19)$$

对于轻元素晶体 $\chi_2 \approx 0.03$ ；对于重元素晶体 $\chi_2 \approx 0.005$ 。

其次，晶体表面的氧化层，或无定形的杂质层也会对 χ_{\min} 有贡献。一般复盖层总是很薄，因此不必考虑多次散射，但是单次散射的贡献不能忽略，这部分贡献记为 χ_3 。在高

能条件下，粗略地给定：

$$\chi_3 = \phi_1^{-1} \sum v_i \pi b_i^2, \quad (20)$$

其中： v_i 为第 i 种原子的面密度； b_i 为第 i 种原子与探针粒子的碰撞直径。

总的最低产额为三项贡献之和：

$$\chi_{\min} = \chi_1 + \chi_2 + \chi_3. \quad (21)$$

实际上，考虑了上述两项修正 (χ_2, χ_3) 后， χ_{\min} 的理论值仍旧远低于实验值。Barrett 根据计算机模拟，给出了单定向沟道最低产额 χ_{\min} 的拟合表达式^[6]：

$$\chi_{\min} = 3Nd\pi\rho^2[1 + (0.65\phi_{1/2}d/\rho)^2], \quad (22)$$

计算的结果与实验值的比较见表 1、2、3。

最后，我们指出，样品表面的杂质、氧化层和表面损伤层以及束流发射都会使沟道半宽度下降。例如，J. U. Andersen 等人曾经估计过 1 MeV He 入射 Si〈110〉沟道时，上述因素引起的束流发射，他们估算出在深度 300 Å 处总的角散度约为 0.08°^[10]。若用这个估算值来校正本文 6 弦热平均势的计算结果，那末将得到 $\phi_{1/2} \approx 0.73^\circ$ 。这个值与实验值在实验的精度范围内是一致的。另一种方法是：根据实验测得的沟道对准谱 ($\phi = 0^\circ$) 的表面峰面积，把表面氧化层和表面损伤层等因素的贡献折算成等效的无定形薄层。假定这个无定形层造成束流粒子的方向分布成高斯型，那末其标准偏差可用多次散射理论估计^[11]。把这一步计算结合进本文的计算，将改善 χ_{\min} 和 $\phi_{1/2}$ 理论计算值与实验值的符合程度。例如，估计 Si 晶体表面的 SiO₂ 层厚度约为 25 Å（一般 20 Å ~ 30 Å）。1000 keV H⁺ 通过 SiO₂，用多次散射理论算得角散度约为 0.0435°，若用这个值来校正表 2 中半路平面模型算得的值，那末将得到 $\phi_{1/2} \approx 0.4443^\circ$ ，与实验结果一致。由于 W 晶体表面氧化层较薄，一般不作修正。

参 考 文 献

- [1] S. T. Picraux, in "New Uses of Ion Accelerators", Edited by J. F. Ziegler, Plenum Press, New York (1975) Ch. 4.
- [2] J. U. Andersen, N. G. Chechenin and Zhang Zuhua; *Nucl. Instrum. & Method*; 194(1982); J. U. Andersen, N. G. Chechenin, Yu. A. Ti, Moshnikov and Zhang Zuhua; *Rad. Effects*, 83, 91(1984).
- [3] S. T. Picraux, W. L. Blown and W. M. Gibson, *Phys. Rev.*, B6, 1382(1972).
- [4] K. Morita and H. D. Carstanjen, *Rad. Effects*, 28, 97(1976).
- [5] J. Lindhard, *Mat.-Fys. Medd. Dan. Vidensk Selsk.* 34, 11(1965).
- [6] J. H. Barret, *Phys. Rev.*, B3, 1527(1971).
- [7] J. U. Andersen, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vidensk Selsk.* 36, 1(1967).
- [8] J. U. Andersen and L. C. Fedman, *Phys. Rev.*, 81, 2063(1969).
- [9] K. Sato, M. Koiwa, M. Hirabayashi and S. Yamaguchi, *Rad. Effects*, 54, 227(1981).
- [10] J. U. Andersen, O. Andersen, J. A. Davies and E. Uggerhøj, *Rad. Effects*, 7, 25(1971).
- [11] J. Linhard, *Mat.-Fys. Medd. Dan. Vidensk Selsk.* 34, 34(1965).

Continuum Model and Multistring Thermally Averaged Potential Calculation of Axial Channeling Dip

Jiang Binyao, Zhang Zuhua, Zou Zuyao Yang Genqin and Zou Shichang

(Shanghai Institute of Metallurgy, Academia Sinica)

Abstract

Axial channeling dip has been calculated by use of continuum model and multistring thermally averaged potential. For the calculation of $E_{\perp}-A(E_{\perp})$ curve, instead of the dividing-cell method reported by K. Sa to *et al.*, a random sampling procedure is used to improve the adaptability of the computer program. For the case of 1 MeV He on Si $\langle 110 \rangle$ channel, a $\psi_{1/2}$ value of 0.81° is obtained by use of half way plane model with multistring thermally averaged potential. This result is much closer to the experimental value ($\psi_{1/2}^{\text{exp}} = 0.75^\circ$) as compared with the $\psi_{1/2}$ value of 0.89° calculated by S. T. Picraux *et al.* with single string static potential. The differences of $\psi_{1/2}$ and χ_{mis} value between theoretical calculations and experiments and the possible ways for improving the theoretical calculation are also discussed in this paper.