

低能 Si^+ 离子注入 GaAs 材料的沟道效应和射程分布*

江炳尧 沈鸿烈 周祖尧 夏冠群†

中国科学院上海冶金所离子束开放实验室, †第四研究室, 上海 200050

(1991年10月18日收到; 1991年12月20日收到修改稿)

本文采用蒙特卡洛方法模拟低能 Si^+ 离子注入 GaAs 单晶的力学运动, 以此考察了低指数轴沟道, 高指数轴沟道和平面沟道的沟道效应对射程分布的影响。模拟计算和实验结果都表明, 当入射角为传统的 7° 时确实存在着沟道效应, 使射程分布偏离高斯分布, 即所谓的分布拖尾。当入射角大于三倍的沟道临界角同时避开沟道效应对较强的高指数轴沟道和平面沟道, 射程分布相当接近于入射无定形 GaAs 的射程分布, 本文的研究结果为采用低能 Si^+ 离子 ($E \leq 30\text{keV}$) 注入 GaAs 制备浅结的工艺提供了理论依据。

PACC: 6170T, 6180M

一、引言

砷化镓材料具有比硅更高的电子迁移率及饱和漂移速度, 可以工作在微波和超高速状态, 因此研制砷化镓高速集成电路成为目前半导体研究的热点之一。GaAs MESFET普遍采用 Si^+ 注入进行有源层的掺杂, 但是离子注入易受沟道效应的影响, 发生载流子分布拖尾, 影响器件的性能, 特别是在注入离子能量较低的情况下。为了求得最佳的离子注入的入射角, 得到浅结, 本文采用蒙特卡洛方法模拟低能 Si^+ 离子注入 GaAs 单晶的力学运动, 考察了在不同入射角的条件下低指数轴沟道, 高指数轴沟道和平面沟道的沟道效应对射程分布的影响。并用 Lindhard 的沟道理论对模拟结果作了分析和比较, 得到一致的结论。

二、模拟计算的基本假设和方法

Robinson 认为对于能量超过 100 eV 的离子, 用二体相互作用代替多体相互作用是一个合理的近似^[1]。如果入射离子的能量大于 10 keV , 离子处于 100 eV 以下经历的射程对于离子经历的全部射程来说已经是无足轻重了。因此在模拟计算中以二体近似为基础而略去了远距离上离子与介质原子的相互作用, 把最大核碰撞参数限制在晶体中最邻近的原子间距上。

由于晶体材料中原子的有序排列, 注入离子有可能与晶体原子进行相互无关的单一

* 国家自然科学基金重大项目。

碰撞或者一系列相互有关的关联碰撞。因此取一个 GaAs 晶胞作为基本单元，以其中一个原子作为坐标原点，这样其余原子的坐标也就确定了。如果运动离子越出晶胞，则做平移操作使相邻于运动离子轨迹的区域在晶胞内重演。

在离子与晶格原子的二体碰撞中，由于离子-原子间的有效作用距离相当小，离子在晶胞中的运动轨迹可采用折线近似。折线是离子实际运动轨迹的渐近线。

此外在离子与原子互相作用时，离子与原子核的弹性碰撞和核外电子的非弹性碰撞是同时发生的，存在着一定的相互关系，然而相关程度不大。为了方便，假定非弹性碰撞过程中引起系统总的能损损失，而影响散射过程很小，在一级近似中可看作彼此无关。在模拟计算中采用了 Biersack 的二体势和由此势算得的散射积分^[2]。电子阻止能损采用 Ziegler TRIM 中的电子阻止程序计算^[3]。

实际上晶格原子存在着热振动。晶格原子热振动的周期约为 10^{-13} 秒的量级，而离子与晶格原子的有效碰撞时间约为 10^{-16} 秒的量级，比晶格原子热振动的周期短得多。因此在碰撞过程时可认为晶格原子静止于它热振动位移位置上。热振动的晶格原子围绕平衡位置的分布近似可用高斯分布函数表达^[4]：

$$d_p(r) = \frac{d(r^2)}{\rho^2} e^{-\frac{r^2}{\rho^2}} \alpha, \quad (1)$$

式中： $\alpha \approx 1$ 为归一化常数， ρ 是两维热振动振幅的均方值。为了模拟实际的离子注入，每一个注入离子在晶胞表面的入射位置采用随机投点的方法。为了得到统计性较好的射程分布，大约需要计算 5000 个以上的入射离子。

三、计算结果与讨论

1. 低指数轴沟道效应

图 1、2 所示是能量为 10 keV 的 Si^+ 离子沿 $\langle 100 \rangle$ 晶向注入 GaAs 单晶靶在不同

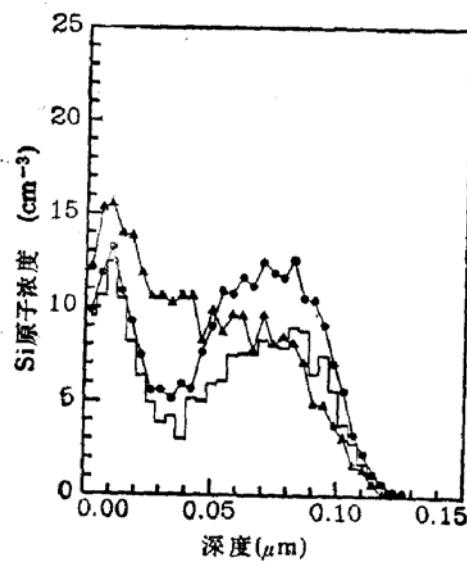


图 1 10 keV $\text{Si}^+ \rightarrow \text{GaAs} \langle 100 \rangle$ 的射程分布
△ 0° ● 2° ▲ 4°

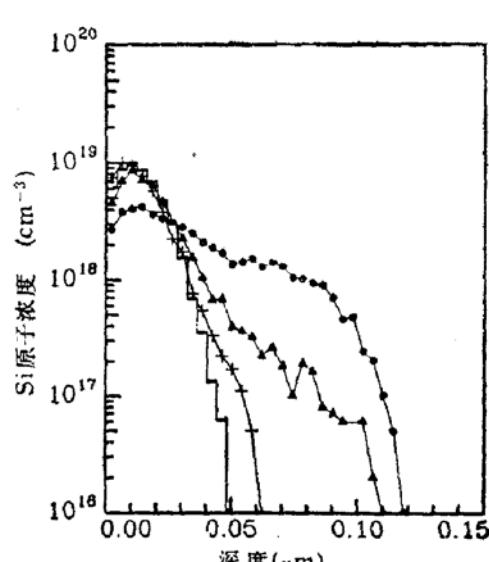


图 2 10 keV $\text{Si}^+ \rightarrow \text{GaAs} \langle 100 \rangle$ 的射程分布
● 5° □ 7° + 15° △ 7° (无定形 GaAs)

入射角的条件下的射程分布。

计算时方位角取为偏离 $\{100\}$ 面 22.5° 以避开面沟道的影响, 当注入离子的入射角小于沟道临界角(根据 Lindhard 的沟道理论, 在此条件下, 沟道临界角约为 5.378°), 射程分布呈双峰状, 接近表面的峰与离子注入无定形 GaAs 靶的射程分布相当。而较深的峰显然是由一些穿透较深的离子引起的。按 Lindhard 的沟道理论可作如下分析:

设入射离子(Z_1)与单晶靶(Z_2)的一个低指数轴成 ψ 角, 若只考虑单根弦, 在距离原子弦 r 处穿透表面后的横向能量为:

$$E_\perp = E\phi^2 + U(r), \quad (2)$$

其中: E 是入射离子的能量, $U(r)$ 为静态沟道连续势, 本文采用 Lindhard 的标准连续势^[5]:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d} \ln \left(1 + \frac{C^2 a^2}{r^2} \right), \quad (3)$$

其中: $C \approx \sqrt{3}$; $a = 0.8853 a_0 (Z_1^{1/3} + Z_2^{1/3})^{-1/2}$ 为屏蔽长度, a_0 为玻尔半径, d 为原子列上的原子间距。注入离子在轴沟道中作受制约运动的条件为^[6]:

$$r_{\min}(\phi, l) > 1\phi, \quad (4)$$

式中: r_{\min} 为入射离子对原子弦的最小逼近距离; l 为对原子弦的瞄准距离, 这个条件在 $l = 0$ 时也应满足, 这是对入射离子保持受沟道制约的运动状态限制最严的情况。 ϕ 为入射离子对原子弦的入射角。

显然 r_{\min} 由横向能量守恒联系于入射离子对原子弦的入射角和入射距离 r :

$$u(r_{\min}) = E_\perp, \quad (5)$$

根据 2、4、5 式可求在不同入射角的条件下, 入射离子能够处于受沟道制约的运动状态的最小入射距离 r 。图 3a 表示 GaAs 单晶 $\langle 100 \rangle$ 轴沟道横截面的几何形状, 荷能离子若在半径 r 的区域内入射, 由于过分接近原子弦, $U(r)$ 较大, 穿透表面后获得的横向势能 E_\perp 太大, 不能作受沟道制约的运动, 与入射无定形靶的情况类似, 邻近表面的峰(随机峰)就是由这些作随机运动的入射离子构成的。因此它的形状也就与入射无定形靶的射程分布相当。而在半径 r 区域外入射的离子由于获得的横向势能较小, 能够处于受沟道制约的运动状态, 穿透得比较深形成了第 2 个峰(沟道峰)。若增大入射角, 退道离子急剧增加, 沟道峰向表面移动并逐渐消失。

表 1 10 keV Si^+ $\rightarrow \text{GaAs} \langle 100 \rangle$

入射角	沟道理论	模拟计算
0°	0.299	0.283
1°	0.307	0.306
2°	0.335	0.319
3°	0.393	0.373
4°	0.518	0.464

表 1 为 10 keV 的 Si^+ 离子沿 $\langle 100 \rangle$ 轴沟道方向注入 GaAs 单晶靶, 在不同入射角的条件下, 作随机运动的离子占全部入射离子的比率(随机峰的面积与射程分布总面积的

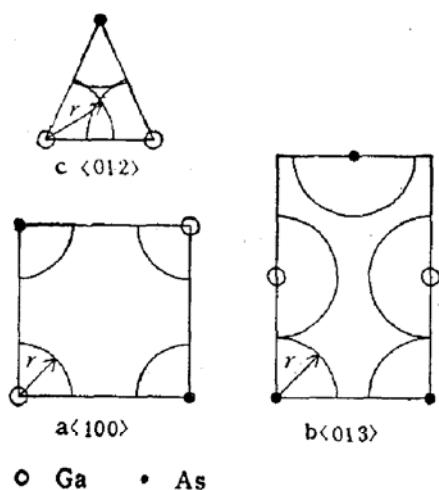


图 3 部分轴沟道横截面的几何形状

a <100> b <013> c <012>

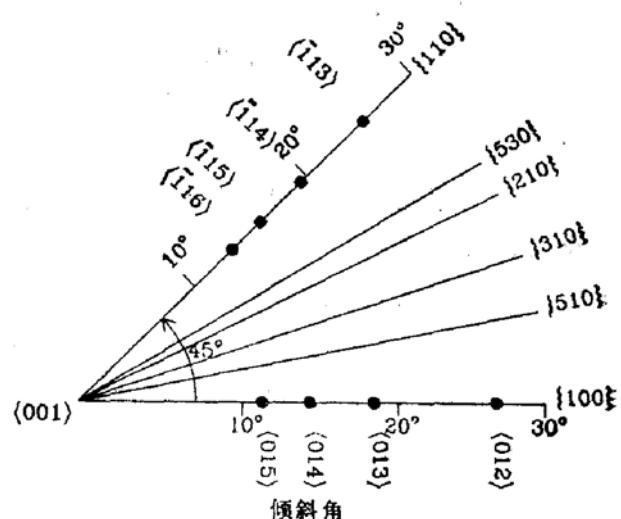


图 4 立方晶系<100>晶向的部分极图

比), 模拟计算的结果与用 Lindhard 沟道理论估计的比较。

当入射角为传统的 7° 时, 射程分布仍然偏离入射无定形靶的射程分布, 如图 2 所示。在模拟入射无定形靶的射程分布时入射角也相应地偏离靶法线方向 7° , 以消除角度不同的影响。当入射角为 15° 时, 射程分布相当接近于入射无定形靶的射程分布。

2. 高指数轴沟道效应

图 4 所示是立方晶系<001>晶向倾斜角 30° 以下的主要轴沟道和面沟道。为了方便选择<015>、<014>、<013>、<012>等高指数轴沟道作为考察对象, 计算时方位角为 0° , 即在{100}面中, 入射角分别为 11.8° 、 14.0° 、 18.4° 、 26.6° , 相当于准直入射。模拟结果与入射无定形靶的射程分布的比较如图 5 所示, 除<013>轴沟道外其余的沟道效应

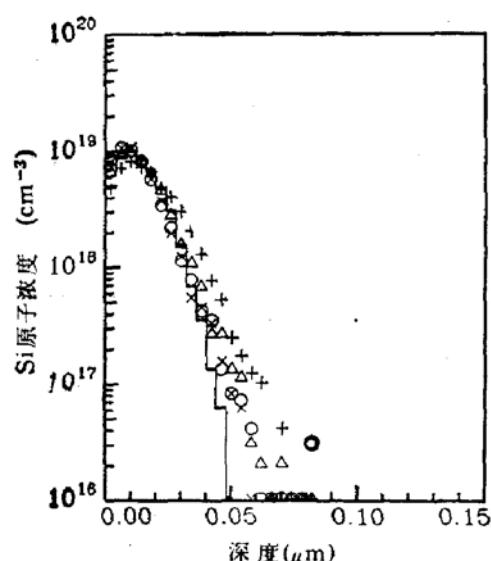


图 5 准直入射高指数轴沟道的射程分布

× <012> + <013> ▲ <014>
○ <015> △ 7° (无定形 GaAs)

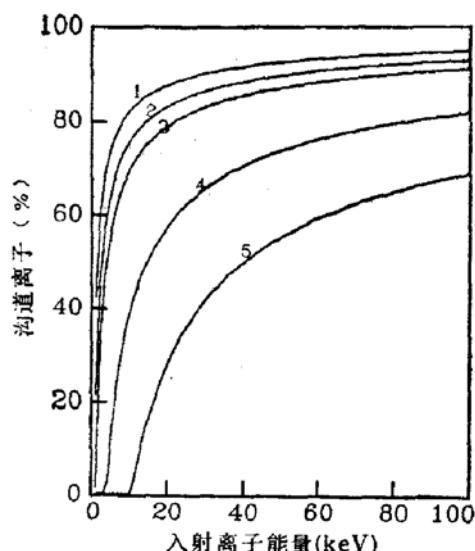


图 6 沟道离子占全部入射离子的比率与入射能量的关系

1 <110> 2 <111> 3 <100> 4 <013>
5 <012>

并不显著。按 Lindhard 的理论, 离子入射能量的降低虽然使沟道的临界角增大了, 但是沟道的有效势垒 $E\phi_1$ (ϕ_1 为沟道的临界角) 下降得更快, 使入射离子能够处于受沟道制约运动状态的最小入射距离 r 增大, 减小了半径 r 外的沟道区域。这种情形对于高指数轴沟道尤其严重, 如图 3b, c 所示 $\langle 012 \rangle$

的沟道区域所剩无几, $\langle 013 \rangle$ 的沟道区域相对大一些, 这与模拟计算的结果是相应的。图 6 所示是准直入射轴沟道的情况下作沟道运动的离子占全部入射离子的比与入射能量的关系。图中可见随着入射能量的下降沟道粒子显著减少。特别是对于 $\langle 012 \rangle$ 轴沟道, 当能量低于 10 keV 时根本就不存在沟道效应。由此看来低能下沟道效应的增强主要是由于低指数轴沟道临界角的增大导致的, 对于高指数轴沟道虽然临界角增大了但是由于沟道区域的大幅度减少, 沟道效应大大削弱了。因此指数较高的轴沟道实际上已丧失了沟道效应。

3. 平面沟道效应

除了高指数轴沟道外, 从图 4 中可见还有 $\{100\}$... $\{110\}$ 等平面沟道。计算时入射离子的运动方向平行于原子平面, 同时偏离 $\langle 001 \rangle$ 晶轴方向 15° 。模拟结果如图 7 所示, 除了 $\{100\}$ 和 $\{110\}$ 二个平面沟道外其余的沟道效应是很微弱的。由于离子在平面沟道中发生关联散射的程度不如轴沟道中那样强烈, 平面沟道的势垒比轴沟道的低一个数量级。因此平面沟道的临界角比轴沟道的小得多。平面沟道中离子受制约运动的条件^[7]为:

$$\zeta^2(1 + \zeta^2)^2[(1 + \zeta^2)^{1/2} - \zeta] > \alpha, \quad (6)$$

式中: $\zeta = y_{\min}/Ca$; $\alpha = E_p/E$;

$$E_p = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2\pi C^3 a N d_p},$$

其中: N 为靶的原子密度; d_p 为原子平面的间距。

根据此条件算得的 $\{100\}$ 和 $\{110\}$ 平面的随机粒子分别占全部入射粒子的 92.3% 和 60.6%, 与模拟结果定性相符。因此指数较高的平面沟道实际上也丧失了沟道效应。

4. 束流发散和晶格原子热振动的影响

以上的模拟计算中假定束流是完全准直的, 但是实际上束流都存在着一定的发散角, 由于角度比较小对计算影响不大。此外还假定晶格原子是静止不动, 但是实际工艺上都是在常温下注入, 晶格原子存在着热振动, 一般这不会引起沟道粒子轨迹的激烈变动, 但是增加了注入离子与晶格原子发生激烈碰撞的可能性, 使沟道粒子的退道几率增加。这种现象有利于减小射程分布的拖尾。

5. 与实验的比较

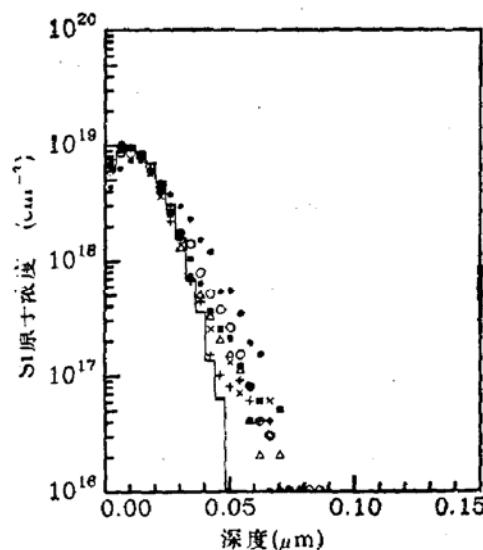


图 7 准直入射平面沟道的射程分布

○ $\{100\}$ ● $\{110\}$ × $\{210\}$ + $\{310\}$
△ $\{510\}$ ■ $\{530\}$ Δ 7° (无定形 GaAs)

图 8 为模拟计算与文献实验结果^[3]的比较。实验是能量分别为 10 keV、20 keV 和 30 keV 的 Si^+ 离子在室温下偏离 $\langle 100 \rangle$ 晶向 7° 注入 GaAs 单晶, 剂量为 $2 \times 10^{13}/\text{cm}^2$, 然后用 SIMS 测量入射离子的射程分布。因此在模拟计算中考虑了晶格热振动对射程分布的影响。在 GaAs 晶体中 Ga 原子与 As 原子的热振动振幅的均方值是不同的, 但是它们的原子质量相当接近可近似认为相同并取 Ge 原子的一维热振动振幅的均方值 0.085 \AA (室温)^[19]作为平均近似值。在模拟 Si^+ 离子入射无定形 GaAs 的射程分布时, 入射角也相应地偏离靶法线方向 7° , 以消除角度不同的影响。如图所示当 Si^+ 离子的入射能量为 10 keV 时, 射程分布的拖尾是很严重的, 随着入射能量的增大拖尾相应地减弱。这是因为拖尾是由部分注入离子散射进入低指数轴沟道造成的, 离子入射能量的增大使得沟道的临界角减小, 从而使散射进入低指数轴沟道的离子减少了。

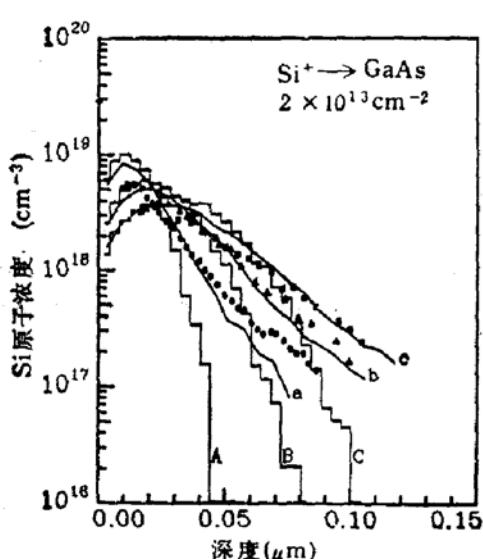


图 8 模拟计算与文献实验结果的比较

模拟计算(无定形): A 10keV B 20keV C 30keV

模拟计算(单晶): a 10keV b 20keV c 30keV

实验结果(单晶): ● 10keV ▲ 20keV ■ 30keV

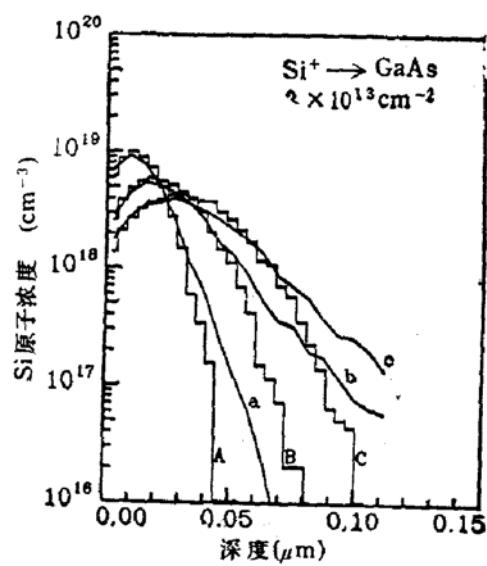


图 9 理论上的最佳逼近

模拟计算(无定形): A 10keV B 20keV C 30keV

模拟计算(单晶): a 10keV b 20keV c 30keV

四、结 论

综上所述对于低能 Si^+ 离子 ($E \leq 30 \text{ keV}$) 注入 GaAs 单晶 ($\langle 100 \rangle$ 晶向) 可得出如下的结论:

1. 在偏 7° 的注入条件下确实存在着沟道效应使得射程分布拖尾。
2. 分布拖尾主要是由部分注入离子散射进入低指数轴沟道造成的, 高指数轴沟道和平面沟道的沟道效应随着能量的下降而削弱, 不是造成分布拖尾的主要原因。
3. 沟道效应不可能完全避免, 当注入离子的入射角大于三倍以上的沟道临界角, 同时避开沟道效应较强的高指数轴沟道和平面沟道, 可以得到接近于入射无定形 GaAs 的射程分布。建议采用 15° 的入射角, 最好能偏离 $\{100\}$ 平面沟道 7° , 在此条件下模拟计算的

结果如图 9 所示。

致谢: 本文作者与陈酉善进行了有益的讨论, 特致谢意。

参 考 文 献

- [1] O. S. Oen, D. K. Holmes and M. T. Robinson, *J. Appl. Phys.*, **34**, 302 (1963).
- [2] J. F. Ziegler, J. P. Biersack U. Littmark, "THE STOPPING AND RANGE OF IONS IN SOLIDS", 1,111(1985).
- [3] 同参考文献[2], 66.
- [4] 汤家镛、张祖华, “离子在固体中的阻止本领射程和沟道效应”, 238(1986).
- [5] J. Lindhard, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vidensk. Selsk.*, **34**, 11(1965).
- [6] 同参考文献[5], 13.
- [7] 同参考文献[5], 18.
- [8] Suehiro Sugitani, Kimiyoshi Yamasaki, and Hajime Yamazaki, *Appl. Phys. Lett.*, **51**(11), 14 (1987).
- [9] 同参考文献[4], 459.

Channeling Effect for Low Energy Si^+ Ion Implantation in GaAs

Jiang Bingyao, Shen Honglie, Zhou Zuyao and Xia Guanqun*

*Ion Beam Laboratory, *Fourth Laboratory, Shanghai Institute of Metallurgy, Academia Sinica, Shanghai 200050*

(Received 18 October 1991; Revised manuscript received 20 December 1991)

Abstract

Monte Carlo computer simulations based on the binary collision approximation have been employed to study the channeling effect for low energy Si^+ ion implantation in GaAs.

Both the range profiles of implanted ions obtained by simulations and measured by SIMS confirm that the range profiles are broader and deeper than that for implantation into amorphous GaAs if the incident ion beam is tilted 7° from $<100>$ axis.

Simulations show that a 15° tilt combined with 7° rotation from $\{100\}$ plane is an optimum selection for the reduction of the channeling effect, and the depth profiles are quite close to the Gauss distributions.

PACC: 6170T, 6180M