

半导体化合物靶中射程参数的分子轨道法处理

王德宁 王渭源

(中国科学院上海冶金研究所离子注入开放实验室)

1986年5月16日收到

本文用分子轨道法处理半导体化合物靶中射程参数问题,提出了理论模型和计算方法。

处理中发现 III-V 族化合物一般呈正偏离偏差, II-VI 族化合物呈负偏离偏差。且发现偏离系数 γ 只与靶的化学键有关,而在一定的能量范围内,与注入能量及离子的关系不大。

对于呈闪锌矿和纤锌矿的半导体化合物,本文用 sp^3 杂化轨道处理它们的约化重叠积分 S_{AB} 问题,得出了普适的离子性 Δ 与 γ 系数关系,发现 III-V 族化合物的 S_{AB} 呈正值,而 II-VI 族化合物的 S_{AB} 呈负值,这是引起 γ 不同的主要原因之一。

文内对呈负偏离的 $He^+ \rightarrow CdS$ 、 $CdTe$, $H^+ \rightarrow CdTe$ 及 $B^+ \rightarrow CdHgTe$ 系统,正偏离的 $Si^+ \rightarrow GaAs$, $Li^+ \rightarrow Al_2O_3$, $Be^+ \rightarrow InP$ 和 $N^+ \rightarrow GaP$ 系统的 $Se(E)$ 和射程参数 R_s 等实测值与计算值作了比较,均得到了满意结果。

一、引言

离子注入技术是微波器件,光电器件以及 GaAs IC 的基础。应用离子注入技术必需知晓离子的射程参数。虽然 Gibbons^[1]计算了许多化合物靶的离子射程参数,但其基础是简单地把化合物靶当成组成元素的相加,忽略了化学键的影响,实验证实^[2-4],这种处理对一些极性较小的化合物靶误差较小,但对一些极性较大化合物靶则偏差较大。我们在文献[5]中提出的方法,可比较满意地适用于一些正偏离系统,而许多系统如 CdS、CdTe 和 HgCdTe 靶实验证实呈负偏差^[6-8],就不能适用了。

本文应用分子轨道法理论处理化学键对化合物靶射程参数的影响,能处理正和负偏离系统,得到了多种化合物靶准确的射程参数。

二、理论模型

文献[9]详细地介绍了离子第 i' 壳层与靶原子第 i 壳层中电子相互碰撞后传递能量为:

$$s_{ii'} = \pi m v \left\{ \frac{\omega_i}{a} \bar{u}_i \int_{ar_0}^{\infty} \phi_i \phi_i^* r \sqrt{r^2 - a^2 r_0^2} dr \right\}$$

$$+ \frac{\omega_{ii'}}{\beta} \bar{u}_{ii'} \int_{\beta r_0}^{\infty} \phi_{ii'} \phi_{ii'}^* r \sqrt{r^2 - \beta^2 r_0^2} dr \Big\}. \quad (1)$$

这里 m 为电子质量, v 为离子注入速度 ($v \propto E^{1/2}$, E 为离子注入能量). 靶原子的第 i 壳层和离子的第 i' 壳层中电子平均动能, 电子占有数和波函数分别以 $\bar{u}_i, \bar{u}_{ii'}$, $\omega_i, \omega_{ii'}$ 和 $\phi_i, \phi_{ii'}$ 来表示. 两种电子的间距和最接近的距离分别以 r 和 r_0 来表示. 据文献[9],

$$\alpha = \left[1 + \left(\frac{Z_2}{Z_1} \right)^{1/6} \right]^{-1}$$

和 $\beta = 1 - \alpha$, 这里 Z_1 和 Z_2 分别是离子和靶的原子序数.

必须指出, 上述 ϕ_i 是原子靶的波函数, 对二元化合物 AB 靶, 应该用分子靶波函数 ϕ_{AB} 代替 ϕ_i .

按分子轨道法理论, 分子波函数可以用原子波函数的线性组合来表示^[10]

$$\phi_{AB} = N_{AB}(\phi_A + \lambda_{AB}\phi_B). \quad (2)$$

按文献[10], 归一化因子

$$N_{AB}^2 = (1 + \lambda_{AB}^2 + 2\lambda_{AB}S_{AB})^{-1}, \quad (3a)$$

且

$$(\Delta^{-2} - 1)\lambda_{AB}^2 - 2\lambda_{AB}S_{AB} - 1 = 0. \quad (3b)$$

这里 S_{AB} 是分子的约化重叠积分, Δ 为分子的离子性, 其值可见文献^[11]. 有关 S_{AB} 的计算, 将在下面专门叙述. 将式(2)代入式(1), 则

$$s_{ii'} = s_1 + s_2 + s_3 + s_4, \quad (4)$$

而

$$\left. \begin{aligned} s_1 &= \pi m v N_{AB}^2 \left[\frac{\omega_A}{\alpha_A} \bar{u}_A \int_{\alpha_A r_0}^{\infty} \phi_A \phi_A^* r \sqrt{r^2 - \alpha_A^2 r_0^2} dr \right] \\ s_2 &= \pi m v \lambda_{AB}^2 N_{AB}^2 \left[\frac{\omega_B}{\alpha_B} \bar{u}_B \int_{\alpha_B r_0}^{\infty} \phi_B \phi_B^* r \sqrt{r^2 - \alpha_B^2 r_0^2} dr \right] \\ s_3 &= 2\pi m v \lambda_{AB} N_{AB}^2 \left[\frac{\omega_{AB}}{\alpha_{AB}} \bar{u}_{AB} \int_{\alpha_{AB} r_0}^{\infty} \phi_{AB} \phi_{AB}^* r \sqrt{r^2 - \alpha_{AB}^2 r_0^2} dr \right] \\ s_4 &= \pi m v \left[\frac{1}{\beta} \omega_{ii'} \bar{u}_{ii'} \int_{\beta r_0}^{\infty} \phi_{ii'} \phi_{ii'}^* r \sqrt{r^2 - \beta^2 r_0^2} dr \right] \end{aligned} \right\}. \quad (5)$$

文献[9]给出了 s_1, s_2 , 及 s_4 中积分的求算, 这里着重讨论 s_3 中积分求算, 记

$$I_{AB} = \int_{\alpha_{AB} r_0}^{\infty} \phi_A \phi_B^* r \sqrt{r^2 - \alpha_{AB}^2 r_0^2} dr.$$

这里 A, B 原子的 Slater 轨道波函数分别为 $\phi_A = A_A(\alpha_A r_0)^{n_A} r^{n_A - 1} e^{-2\xi_A r}$,

$$\phi_B = A_B(\alpha_B r_0)^{n_B} r^{n_B - 1} e^{-2\xi_B r}.$$

且设 $\alpha_{AB} = \alpha_A^{1/2} \alpha_B^{1/2}$, 则上式可化为

$$\begin{aligned} I_{AB} &= A_A A_B (\alpha_A r_0)^{n_A + 1/2} (\alpha_B r_0)^{n_B + 1/2} \int_{\alpha_{AB} r_0}^{\infty} r^{n_A - 1/2} \cdot r^{n_B - 1/2} \\ &\quad \cdot e^{-2(\xi_A + \xi_B)r} \cdot \left(\frac{r^2}{\alpha_A \alpha_B r_0^2} - 1 \right)^{1/2} dr. \end{aligned} \quad (6)$$

引入变量 $x^2 = r^2 / \alpha_A \alpha_B r_0^2$, 则式(6)变为

$$I_{AB} = A_A A_B (\alpha_A r_0)^{n_A + \frac{1}{2}} (\alpha_B r_0)^{n_B + \frac{1}{2}} \int_1^\infty x^{n_A + n_B + 1} e^{-\mu x} \cdot (x^2 - 1)^{\frac{1}{2}} dx. \quad (7)$$

这里 $\mu = \mu_A + \mu_B$, $\mu_A = 2\xi_A \alpha_A r_0$, $\mu_B = 2\xi_B \alpha_B r_0$ 用文献[9]所述的分别积分法可得

$$(I_{AB})_{n,l} = \frac{1}{2 \cdot 10^n} \sum_{i=n+1}^{2n} a_{i-1} \mu_{nl}^i K_i(\mu_{nl}). \quad (8)$$

这里 $n = n_A + n_B$, 即 A, B 原子主量子数之和, a_{i-1} 为积分系数可参阅文献[9], 角量子数 $l = l_A + l_B$. A_A, A_B 的表式也可见文献[9], $K_i(\mu_{nl})$ 为第二类改进的 Bessel 函数.

在分子靶中, 电子能量损失可用下式表示^[9]

$$Se_{AB} = \int_{r_{0,\min}}^\infty 2\pi r \epsilon_{tot}(r) dr, \quad (9a)$$

这里

$$\epsilon_{tot}(r) = \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 \quad (9b)$$

将式(9b)和(5)代入式(9a), 采用文献[9]类同积分后得

$$Se_{AB} = Se_1 + Se_2 + Se_3 + Se_4. \quad (10a)$$

而

$$\begin{aligned} Se_1 &= \frac{2\pi^2 m v}{\alpha_A^3} N_{AB}^2 \sum_{n_A l_A} \sum_{i=l_A+1}^{2n_A} \omega_{n_A l_A} \bar{u}_{n_A l_A} \times \frac{a_{i-1} \cdot 2^i}{2 \cdot 10^{n_A}} \cdot \frac{i!}{\xi_{i,n_A l_A}^2}, \\ Se_2 &= \frac{2\pi^2 m v}{\alpha_B^3} \lambda_{AB}^2 N_{AB}^2 \sum_{n_B l_B} \sum_{i=n_B+1}^{2n_B} \omega_{n_B l_B} \bar{u}_{n_B l_B} \times \frac{a_{i-1} \cdot 2^i}{2 \cdot 10^{n_B}} \cdot \frac{i!}{\xi_{i,n_B l_B}^2}, \\ Se_3 &= \frac{4\pi^2 m v}{\alpha_{AB}^3} \lambda_{AB} N_{AB}^2 \sum_{n_l} \sum_{i=n+1}^{2n} \omega_{n_l} \bar{u}_{n_l} \times \frac{a_{i-1} \cdot 2^i}{2 \cdot 10^n} \cdot \frac{i!}{\xi_{i,n_A l_A} \xi_{i,n_B l_B}}, \\ Se_4 &= \frac{2\pi^2 m v}{\beta^3} \sum_{n_l' l_l'} \sum_{i=n_l'+1}^{2n_l'} \omega_{n_l' l_l'} \bar{u}_{n_l' l_l'} \times \frac{a_{i-1} \cdot 2^i}{2 \cdot 10^{n_l'}} \cdot \frac{i!}{\xi_{i,n_l' l_l'}^2}. \end{aligned} \quad (10b)$$

当注入角度较大, 或靶的原子量(或分子量)较大时, 按文献[9]的推导, $r_{0,\min}$ 可取为零才能得式(10b)的结果. 如果 $r_{0,\min}$ 不取零, 则 Se 的表式应采用文献[9]中式(23)的形式. 当速度相当高时 Se 的表式应采用文献[13]的表示. 这里

$$\omega_{nl} = \omega_{n_A l_A}^{\frac{1}{2}} \omega_{n_B l_B}^{\frac{1}{2}}, \bar{u}_{nl} = \bar{u}_{n_A l_A}^{\frac{1}{2}} \bar{u}_{n_B l_B}^{\frac{1}{2}}$$

的近似, 在以后计算中可发现, 给计算带来很多方便, 但误差并不大.

三、一些模型参数的计算方法

以下介绍理论模型中一些重要参数, 如 $\bar{u}_{n_A l_A}$, $\omega_{n_A l_A}$, Δ , S_{AB} 等的计算方法. 按定义

$$\bar{u}_{n_A l_A} = 2.19 \times 10^6 \sqrt{E_{n_A l_A}}. \quad (11a)$$

这里 $E_{n_A l_A}$ 为第 $n_A l_A$ 壳层轨道电子的轨道能量, 可由文献[14]的表值中查到, 而 $\omega_{n_B l_B}$ 也应有类似的形式。

$\omega_{n_A l_A}$ 可根据原子的电子分布算出, 如 Li 原子的电子分布为 $1s^2$ 、 $2s^1$, 氧原子为 $1s^2$ 、 $2s^2$ 、 $2p^4$ 等等……, $\omega_{n_A l_A}$ 即为 s 、 p 等上角所示的数值。

Δ 是分子极性的一个重要标志, Δ 越大, 分子的离子性越强, 按式(3b)则 λ_{AB} 值也越大。 Δ 值大小直接影响分子靶的 S_{AB} 值, 文献[11]计算的一些 III-V 和 II-VI 族半导体化合物的 Δ 值可直接引用, 根据他们提供的方法, 其它一些半导体化合物的 Δ 值也可计算。对于极性很大, 乃至离子化合物的 Δ 值, 可根据下式来计算

$$\Delta = 1 - \exp \left[-\frac{1}{4} (x_A - x_B)^2 \right]. \quad (11b)$$

这里 x_A 和 x_B 分别表示 A, B 原子的负电性, 在一般化学手册中可查到。

约化重叠积分 S_{AB} 的计算比较复杂, 已知闪锌矿或纤锌矿结构的半导体同金钢石结构 Si 或 Ge 一样, 其共价键以 sp^3 杂化轨道形式出现, Si 原子的电子分布为 $1s^2$, $2s^2$, $2p^6$, $3s^2$, $3p^2$, 在形成 sp^3 杂化轨道时 $3s$ 中一个电子跃迁到 $3p$ 轨道上, 于是一个 Si 原子的一个 $3s$ 电子与另三个原子的三个 p 电子相互形成 sp^3 轨道。闪锌矿结构如 GaAs, 其中 Ga 的外层电子为 $4s^2$, $4p^1$, 同样一个 s 电子跳到 p 轨道上与 As 原子的外层电子 $4s$ 、 $4p^4$ 相互形成 sp^3 杂化轨道, 同理纤锌矿结构如 CdS, 也可形成 sp^3 杂化轨道, 由于内层电子 S_{AB} 甚小可以忽略, 只需考虑外层电子所形成的杂化轨道对 S_{AB} 的贡献, 根据文献[10], sp^3 杂化轨道可用一组表式来表示

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \frac{1}{2} \phi_s + \frac{\sqrt{3}}{2} \phi_{p_z}, \\ \phi_2 &= \frac{1}{2} \phi_s - \frac{1}{\sqrt{12}} \phi_{p_x} + \sqrt{\frac{2}{3}} \phi_{p_y}, \\ \phi_3 &= \frac{1}{2} \phi_s - \frac{1}{\sqrt{12}} \phi_{p_x} - \frac{1}{\sqrt{6}} \phi_{p_y} + \frac{1}{\sqrt{2}} \phi_{p_z}, \\ \phi_4 &= \frac{1}{2} \phi_s - \frac{1}{\sqrt{12}} \phi_{p_x} - \frac{1}{\sqrt{6}} \phi_{p_y} - \frac{1}{\sqrt{2}} \phi_{p_z}. \end{aligned} \quad (12a)$$

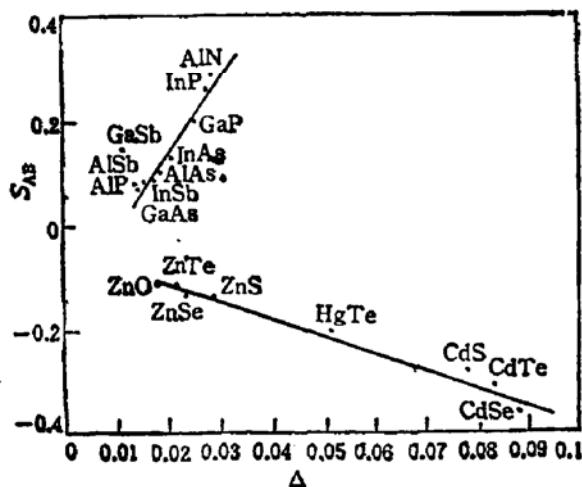
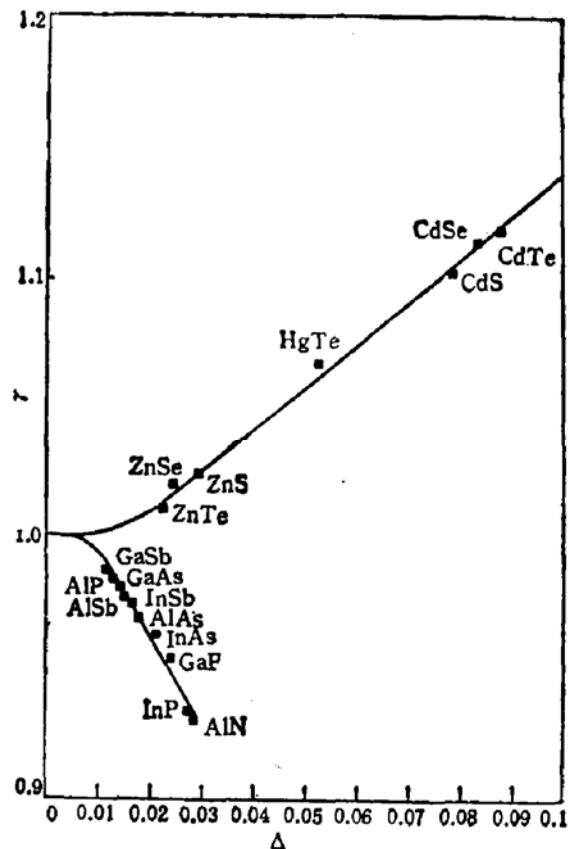
根据 sp^3 杂化轨道的各向同性性质, 则其均值为

$$S_{AB} = \int \phi \phi^* d\tau = \frac{1}{4} \left[\int \phi_1 \phi_1^* d\tau + \int \phi_2 \phi_2^* d\tau + \int \phi_3 \phi_3^* d\tau + \int \phi_4 \phi_4^* d\tau \right]. \quad (12b)$$

将式(12a)代入式(12b), 经整理后可知 sp^3 杂化轨道的 S_{AB} 实际上是一系列 s 、 p 、 sp 轨道的约化重叠积分的组合, 对此文献[15]有详细的介绍, 根据他们介绍的算式, 我们编制了专门程序, 可方便地计算到化合物半导体的 S_{AB} 。对于其它的杂化轨道如 sp^2 , sp , d^2sp^3 等也可用类同方法计算。

四、结果和讨论

一系列闪锌矿和纤锌矿结构的半导体化合物 S_{AB} 的计算示于图 1。可见, 有二点规

图1 S_{AB} 与 Δ 关系图2 共价键化合物 γ 与 Δ 关系

律,一是 III-V 族化合物的 S_{AB} 均呈正值, II-VI 族化合物的 S_{AB} 均呈负值,二是 Δ 值越大, $|S_{AB}|$ 值也越大。这二点规律与文献[16]所述闪锌矿和纤锌矿结构化合物的压电系数所示二点规律完全一致(但符合相反)。我们认为这决不是偶然的巧合,而是受其内在规律——化学键影响所决定的。

由上述规律,结合式(3a)及(3b),求得 λ_{AB} 和 N_{AB}^2 ,代入式(10b)可得考虑化学键影响的 Se_{AB} 。

如果我们定义

$$\gamma = \frac{Se_{AB}}{Se_{Bragg}}, \quad (13)$$

即偏离系数 γ 为 Se_{AB} 对理想 Se_{Bragg} 的偏离程度,这里 Se_{Bragg} 即为 AB 分子中 A 元素和 B 元素的 Se 值的简单加和^[1]。

根据式(13),可计算得各类化合物的 γ 与 Δ 关系示于图 2,可见 Δ 值越大,极性越大,偏离程度也越大(即 γ 越偏离 1),而且对 III-V 族化合物 $\gamma < 1$ 呈正偏离,对 II-VI 族化合物 $\gamma > 1$ 呈负偏离。其原因也是由于化学键影响。由图还可得如下两个关系式

$$\text{对 } S_{AB} < 0 \quad \gamma = 1.61765\Delta + 0.97809, \quad (14a)$$

$$\text{对 } S_{AB} > 0 \quad \gamma = -3.111\Delta + 1.0241. \quad (14b)$$

据此可预言其它未知化合物的 γ 值。至于文献[1]、[17]计算得 Se_{Bragg} 值,乘以 γ 值即可得 Se_{AB} 值,将 Se_{AB} 值代替 Se_{Bragg} 值^[1],再应用文献[17]的计算程序,可得到考虑化学

键影响的射程参数 R_p , ΔR_p 和 ΔR_{\perp} 值。

根据文献[18], 图3示出了极性很大的离子晶体的 F 与 γ 关系, 这里

$$F = \Delta \times \frac{Z_B}{Z_A + Z_B}.$$

可见, 对离子晶体, 除 $F < 0.15$ 外, F 与 γ 关系基本上呈线性关系, 说明 γ 不但随离子性 Δ 的增加而减少, 而且与晶体中离子的原子序数有关。对同一阳离子, 随着阴离子的原子序数 Z_B 增加而增加。对同一阴离子, 随着阳离子的原子序数 Z_A 的减小而减小, 图中还示出离子晶体的 γ 均小于 1, 呈正偏离。

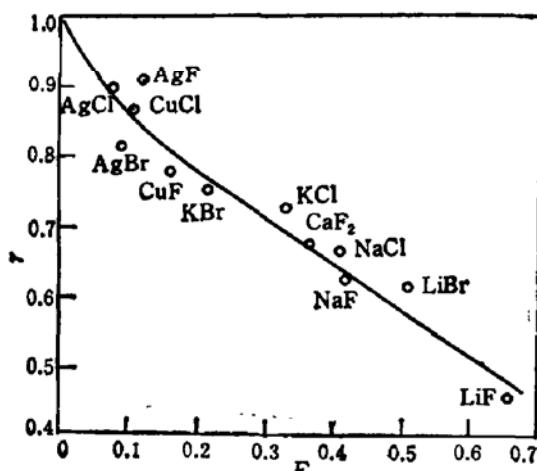


图3 离子晶体的 γ 与 F 关系

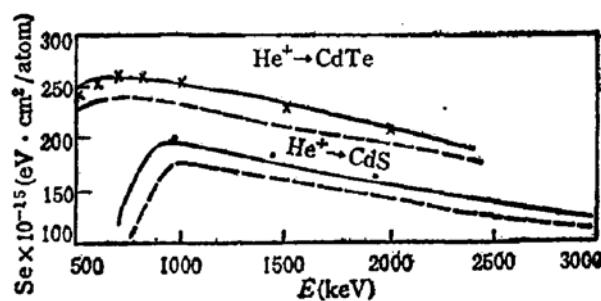


图4 $\text{He}^+ \rightarrow \text{CdTe}, \text{CdS}$ 系统的实测值与计算值比较
—计算值, ×文献[6]、[7]的实测值 ---Bragg 值

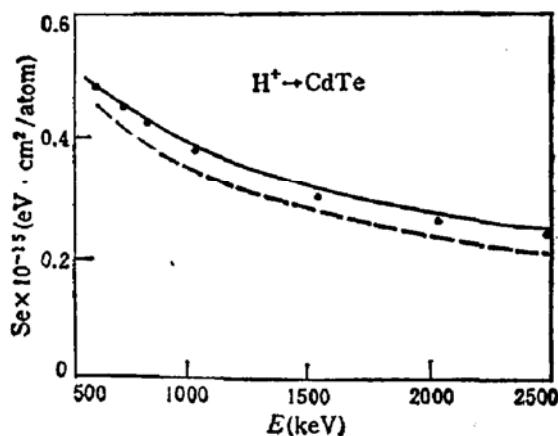


图5 $\text{H}^+ \rightarrow \text{CdTe}$ 系统的实测值与计算值比较
—本文计算值, ---Bragg 值, ●文献[6]的实测值

下面对计算结果与文献上发表的实验值作了比较。图4示出了 $\text{He}^+ \rightarrow \text{CdTe}, \text{CdS}$ 系统的比较, 图中虚线是从 Ziegler^[19]的 He^+ 注入各元素的 S_e 值的简单加和, 实线为本文计算值, 即 Bragg 值乘以 γ 值而得, 而 γ 值取自图2, 对 CdTe 和 CdS 值分别为 1.117 和 1.101。由图可见, 实测值均大于 Bragg 值, 是典型的负偏离系统, 而与本文计算值(实线)相当符合。这一结果证实了本文的计算方法和理论模型是基本准确的, 同时也证实了化学键是产生偏离的主要原因。

图5示出了另一负偏离系统， $H^+ \rightarrow CdTe$ 的比较。在正偏离系统中，我们选择了 $Li^+ \rightarrow Al_2O_3$ 系统进行了比较，用 Bragg 定律得到了 Sc_{Bragg} 值(图6中虚线)，乘以 γ (计算得 $\gamma = 0.895$) 得 Sc_{AB} (图6中实线)，图5和图6均证实了本文提出的理论模型和计算方法是准确的，并且适用于正、负偏离系统。

以下进一步对一些较重离子在一些正、负偏离系统中射程参数 R_p 和 ΔR_p 作一比较。

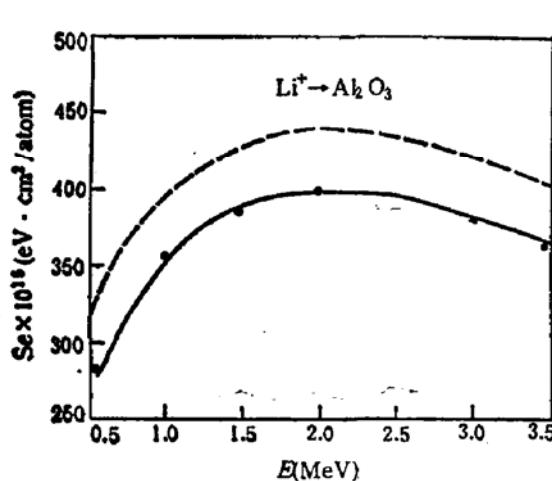


图6 $Li^+ \rightarrow Al_2O_3$ 的实测值与计算值比较
—本文计算值 ---Bragg 值 ○文献[2]实测值

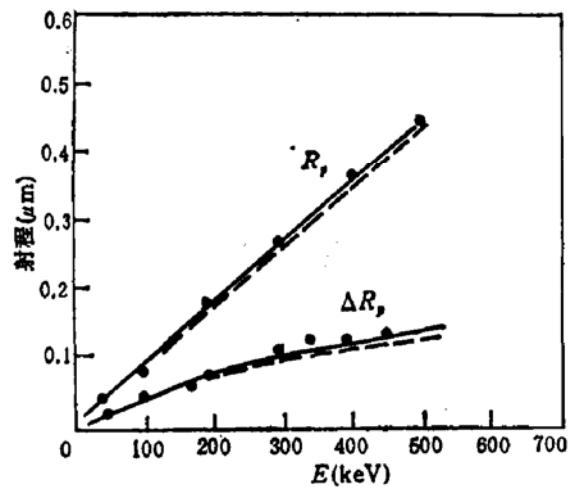


图7 $Si^+ \rightarrow GaAs$ 系统的射程参数的实测值和计算值比较
—本文计算值 ---Bragg 值 ●文献[3]实测值

图7示出了 $Si^+ \rightarrow GaAs$ 系统的实测值与计算值比较结果。实线是用式(10b)的方法计算得 Sc_{AB} 代入文献[17]的计算 R_p , ΔR_p 的程序的计算结果, 虚线是文献[1]的 Bragg 值, 黑圆点为文献[3]的实测值。结果表明 GaAs 系统是正偏离系统。不过由于极性较小, 偏离甚小 ($\gamma = 0.9805$), 因此虚线与实线甚为接近。一般这种系统可不考虑化学键影响而直接应用 Bragg 定律。

表1 正偏离系统 R_p 的实测值与计算值比较

系统	E (KeV)	R_p (μm)		
		Bragg 值	本文计算值	实测值
$Be^+ \rightarrow InP$	35	0.1223	0.1310	0.134[4]
	100	0.3576	0.3829	0.386[4]
$N^+ \rightarrow GaP$	50	0.1045	0.1096	0.112[20]
	80	0.1572	0.1649	0.163[20]
	200	0.3812	0.4002	0.395[20]

一些偏离较大的 $Be^+ \rightarrow InP$, $N^+ \rightarrow Gap$ 系统的 R_p 的比较结果列于表1, 可见由于 InP , GaP 的极性较强 ($\gamma = 0.9342$, 0.9531), 特别是 InP , 化学键影响必需予以考虑。

图8为负偏离系统, $B^+ \rightarrow Cd_{0.2}Hg_{0.8}Te$ 系统的比较结果。可见, 对这类系统, 由于组成该系统的化合物 $HgTe$ 、 $CdTe$ 的 Δ 较大, γ 均较大(见图2), 必需考虑化学键影响。文献[8]的表3列出了实测值与 Bragg 值比较, R_p 的误差在 16—24% 间, ΔR_p 最高误

差可达 48%。而经考虑化学键影响后(图中实线)的结果明显地接近实测值,说明本理论模型适合于三元系系统。

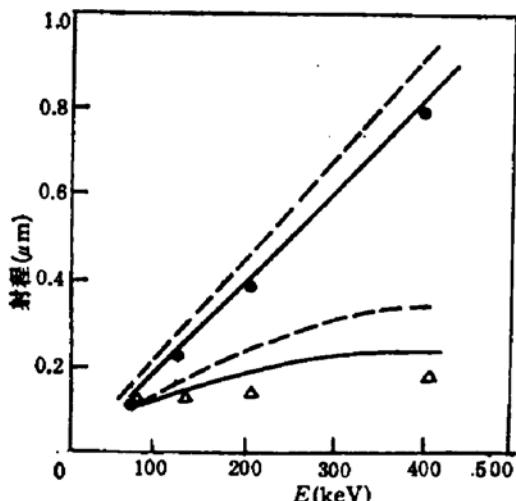


图 8 $B^+ \rightarrow Cd_{0.2}H_{0.8}Te$ 系统的 $R_p/\Delta R_p$
的实测值与计算值比较
——本文计算值 ----Bragg 值
▲文献[8]实测值

从式(2)及(10b)可见,化学键对 Se_{AB} 影响主要取决于系数 λ_{AB} 与 N_{AB}^2 ,这些系数又主要取决于 S_{AB} 和 Δ ,而大量文献均认为它们取决于化合物靶的 sp^3 杂化轨道的化学本质及其结构,而与注入能量无关。这种化学键的影响只有当注入能量大于 10 MeV 情况下,离子速度是如此之快,以至这种影响远小于其它影响,甚至可以忽略。因此我们认为对较重离子,在常用的 10—1000 KeV 能量范围内,对较轻离子在 <4 MeV 范围内,可以认为 γ 不随 E 而变,而且对共价键化合物似乎与注入离子关系也不大,这从图 3 至图 8 比较中也可得到证实,如 H^+ 和 He^+ 注入同

— $CdTe$ 靶,结果证实 γ 相同。当然从式(10b)中也可看出离子项(即 Se_4)与化学键参数 S_{AB}, Δ 无关,不会影响到 γ 值大小。当注入能量 ≥ 10 MeV, $r_{0,\min}$ 不趋于零时,我们编制的程序自动会转入相应表式中予以计算,以保证计算的准确性。

综上所述我们在 10—1000 KeV 能量范围内计算了一系列二元、三元乃至四元化合物中各种离子注入射程参数表,将在另一专著中予以发表。至于 III-V 族化合物均呈正偏离,而 II-VI 族化合物均呈负偏离的更本质物理原因, γ 为常数的更深入的物理、化学本质有待进一步探讨。

参 考 文 献

- [1] J. F. Gibbons, "Projected Range Statistics", 2nd ed., Halsted Press, (1975).
- [2] W. Neuwirth, *Nucl. Instr. and Methods*, 149, 172 (1979).
- [3] D. H. Lee, *Appl. Phys. Lett.*, 30, 327 (1977).
- [4] C. M. Wilke, Gallium Arsenide and Related Compounds, (Proc. of the 7th Internation Symp. on GaAs and Related Compounds, held Silicon Louis Missouri, 1978), p 512.
- [5] 王德宁、王渭源, 物理学报, 32, 925(1983).
- [6] R. A. Langley, R. Blewer, *Nucl. Instr. and Methods*, 132, 109 (1976).
- [7] P. F. Engel, *J. Appl. Phys.*, 45, 38 (1974).
- [8] H. Ryssel, *Phys. Stat. Sol. (a)* 57, 619 (1980).
- [9] F. F. Komarov, et al., *Phys. Stat. Sol. (b)* 58, 389 (1973).
- [10] 金松寿, 量子化学基础及其应用, 上海科学出版社, (1979), PP. 289—291, 及 P. 240.
- [11] T. Soma, et al., *Phys. Stat. Sol. (b)*, 119 K41 (1983).
- [12] E. Clementi, et al., *J. Chem. Phys.*, 38 2686 (1963).
- [13] A. F. Furstenkov, *Rad. Eff.*, 46, 59(1980).
- [14] C. C. Lu, et al., *Atomic Data*, 3, 1—131(1971).
- [15] R. S. Mulliken, et al., *J. Chem. Phys.*, 17, 1248 (1949).
- [16] J. C. Phillips, Bond and Bands in Semiconductor, (Academic Press, 1973), p. 76.
- [17] 程兆年、朱文玉、王渭源, 物理学报 31, 922(1982).
- [18] A. F. Burenkov, *Phys. Stat. Sol. (b)*, 79, K161 (1977).
- [19] J. F. Ziegler, et al., Hydrogen Stopping Powers and Ranges in All Elements, (Dergamon Press, New York

8, 1977).

[20] B. L. Groder, Ion Implantation in Semiconductor and Other Materials, (1974), p. 102.

Molecular Orbital Method for Semiconductor Compound Range Parameter Calculation

Wang Dening and Wang Weiyuan

(Shanghai Institute of Metallurgy, Academia Sinica)

Abstract

Using molecular orbital method, the range parameters of compound semiconductors are treated. The theoretical model and the calculated method are provided not only in positive, but also in negative deviation systems.

In treating, we find that all III-V compounds have positive deviation, all II-VI compounds have negative deviation, and all the deviation coefficients depend not on implanted energy, but on chemical bond.

For compound semiconductors with zincblende and wurtzite structure, the overlap integral S_{AB} is calculated by use of sp^3 hybrid orbital method in negative or positive in all II-VI or III-V compounds respectively and is one of the important reasons resulting in deviation from the Bragg law.

The calculated electronic stopping power and range parameter in $\text{He}^+ \rightarrow \text{CdS}$ and CdTe , $\text{H}^+ \rightarrow \text{CdTe}$ and $\text{B}^+ \rightarrow \text{CdHgHgTe}$ systems with negative deviation are in agreement with the experimental results and the agreement also exists in $\text{Li}^+ \rightarrow \text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{Si}^+ \rightarrow \text{GaAs}$, $\text{Be}^+ \rightarrow \text{InP}$ and $\text{N}^+ \rightarrow \text{GaP}$ systems with positive deviation.