

电子阻止本领 $S_e(E)$ 的 z 振荡及其计算

王 德 宁 王 渭 源

(中国科学院上海冶金研究所)

1981 年 6 月 4 日收到

提 要

本文应用 Hartree-Fock-Slater 势能代替 Thomas-Fermi 势能, 得出电子阻止本领 $S_e(E)$ 的归一化关系式; 同时, 结合有效原子序数概念, 得出能量对 $S_e(E)$ 影响的关系式. 利用前一关系式, 定量计算了 $S_e(E)$ 随离子和靶原子的原子序数 z 变化的振荡关系, 计算结果与实验值相当符合. 利用后一关系式, 定量计算了多种离子-靶体系的 $S_e(E)$, 与文献 [1] 的关系式比较, 本文结果更好地符合实验值, 而且有更广的能量适用范围.

一、引 言

离子注入的重要参数投影射程 R_p 及其偏差量 ΔR_p 的计算中^[2,3] 均涉及到电子阻止本领 $S_e(E)$ 的计算. LSS^[4] 理论中由于应用了 Thomas-Fermi 势能 v_{TF} , 所以得到 $S_e(E)$ 随 z_1 或 z_2 (分别为离子和靶原子的原子序数) 单调地增加, 但许多作者 (例如文献 [5, 8]) 均证实 $S_e(E)$ 随 z_1 或 z_2 具有周期性振荡关系, 其偏离 LSS 计算值的程度, 个别情况达一个数量级. 本文用 Hartree-Fock-Slater 势能 v_{HFS} 代替 Thomas-Fermi 势能 v_{TF} , 得出归一化的 $S_e(E)$ 随 z_1 或 z_2 周期性振荡的定量关系式. 在有效原子序数 z_{eff} 和 v_{HFS} 相结合的基础上, 得到 $S_e(E)$ 的定量关系式. 从而也为上述归一化计算提供了基准电子阻止本领值 $S_e(E)_B$, 上述计算均和实验值作了比较, 符合得较好. 文中还对计算式的物理意义作了讨论.

二、归一化 $S_e(E)$ 的表式

在 v_{TF} 基础上, LSS 理论导出 $S_e(E)$ eV · cm²/atom 的表式为^[3]

$$NS_e(E) = 0.0793z^{1/6} \cdot \frac{c_p}{c_e^{1/2}} \left[\frac{z_1 z_2 (M_1 + M_2)^3}{M_2 M_1^2 (z_1^{2/3} + z_2^{2/3})^{3/2}} \right]^{1/2} \cdot \sqrt{\frac{E}{M_1}}, \quad (1)$$

式中 E 取 keV, c_p , $c_e^{[10]}$ 为与靶原子的原子序数 z_2 , 质量 M_2 和离子的原子序数 z_1 、质量 M_1 以及靶原子密度 d_2 有关的常数. 而 $\sqrt{E/M_1} = 4.98 v/v_0$, 其中 v 为离子注入速度 cm/sec, v_0 为 Bohr 速度, $v_0 = 2.19 \times 10^8$ cm/sec. 经化简(1)式变为

$$NS_e(E) = \frac{1136.2 z_1^{7/6} z_2 d_2}{M_2} \cdot \frac{v}{v_0} (z_1^{2/3} + z_2^{2/3})^{-3/2}. \quad (2)$$

无论(1)式或(2)式,在相同 E 或 ν 下均不能显示 $S_e(E)$ 随 z_1 或 z_2 周期性振荡关系,这是由于应用了 ν_{TF} 的缘故.

现在,我们用 ν_{HFS} 代替 ν_{TF} , 依文献[12],离子和靶原子的 ν_{HFS} 分别为

$$\begin{aligned}\nu_{HFS_1} &= \frac{2z_1}{r} u_{HFS_1}(x'_1), \\ \nu_{HFS_2} &= \frac{2z_2}{r} u_{HFS_2}(x'_2),\end{aligned}\quad (3)$$

式中 $x'_1 = \frac{r}{0.88534} z_1^{1/3}$, $x'_2 = \frac{r}{0.88534} z_2^{1/3}$, r 为离子和靶原子的间距,根据文献[9]的结果归纳得其解析式 $r = \frac{28.138}{16.325 + \sqrt{E/M_1}} - 0.2412$, 其中 E 取 keV, u_{HFS} 值可根据 x'_1 和 x'_2 值由文献[12]查到. 设 α_1 和 α_2 分别表示离子和靶原子的 ν_{TF} 与 ν_{HFS} 的比值,

$$\alpha_1 = \frac{\nu_{TF_1}}{\nu_{HFS_1}}, \quad \alpha_2 = \frac{\nu_{TF_2}}{\nu_{HFS_2}}. \quad (4)$$

α_1 和 α_2 也即表示 ν_{HFS} 偏离 ν_{TF} 的程度. 取 ν_{TF} 有(3)式相似的形式,并参考文献[6,7]离子和靶原子 ν_{TF} 的表式,得到

$$\begin{aligned}\nu_{TF_1} &= \frac{2z_1}{r} u_{TF_1}(x_1) = \frac{2z_1}{r} \left(1 - \frac{x_1}{\sqrt{x_1^2 + c^2}}\right), \\ \nu_{TF_2} &= \frac{2z_2}{r} u_{TF_2}(x_2) = \frac{2z_2}{r} \left(1 - \frac{x_2}{\sqrt{x_2^2 + c^2}}\right).\end{aligned}\quad (5)$$

式中 $c^2 = 3.8$, $x_1 = rz_1^{1/3}$, $x_2 = rz_2^{1/3}$, r 的意义及表式已如上述. (5)式与文献[15]中图5的 T-F 曲线是一致的.

应用文献[8]相同的方法,得到(2)式的改进形式为

$$NS_e(E) = \frac{1136.2 z_1^{7/6} z_2 d_2}{M_2} \frac{\nu}{\nu_0} (\alpha_1^2 z_1^{2/3} + \alpha_2^2 z_2^{2/3})^{-3/2}. \quad (6)$$

记

$$\begin{aligned}z_T &= (\alpha_1^2 z_1^{2/3} + \alpha_2^2 z_2^{2/3}), \\ \eta &= \frac{1136.2 z_1^{7/6} z_2 d_2}{M_2} z_T^{-3/2}.\end{aligned}\quad (7)$$

并令

$$\beta = \frac{S_e(E)_B}{S_e(E)} = F(y) = F\left(\frac{\eta_B}{\eta}\right). \quad (8)$$

β 为一无量纲值,与能量无关; $S_e(E)_B$ 称为基准电子阻止本领,是由实验测定的某一离子-靶体系的 $S_e(E)$ 值或由下节推导算得的 $S_e(E)$ 值. 于是,对同一能量 E 下,不同离子 z_1 注入到同一靶 z_2 中,有关系式

$$y = \left(\frac{z_{T,B}}{z_T}\right)^{-3/2} \left(\frac{z_{1,B}}{z_1}\right)^{7/6}, \quad (9)$$

式中 $z_{T,B}$ 和 $z_{1,B}$ 是作为基准的离子-靶体系的 z_T 值和离子的原子序数. 而对同一能量下,同一离子 z_1 注入到不同靶 z_2 中,

$$y = \left(\frac{z_{T,B}}{z_T} \right)^{-3/2} \left(\frac{z_{2,B}}{z_2} \right) \left(\frac{M_2}{M_{2,B}} \right) \left(\frac{d_{2,B}}{d_2} \right), \quad (10)$$

式中 $z_{T,B}$, $z_{2,B}$, $M_{2,B}$ 和 $d_{2,B}$ 是基准体系靶的 z_T 值和原子序数、原子量和密度。

应用文献中许多实验值,采用逐步逼近方法,得到 β 与 y 有如下关系式:

$$\text{当 } 0.4 \leq \frac{1}{y} \leq 1.3 \text{ 时, } \beta = 2.54y^{1/6} - 1.5;$$

$$\frac{1}{y} \text{ 为其他值时, } \beta = 2.785y^{0.275} - 1.5. \quad (11)$$

据此,由已知的 z_1 , z_2 , M_1 , M_2 , d_2 , α_1 和 α_2 值可方便地算得 y 值,然后由 (11) 式计算 β 值,再结合已知的 $S_e(E)_B$ 值,可算得任何离子-靶体系的 $S_e(E)$ 值。

三、 $S_e(E)$ 的表式

(6)式表示, $S_e(E)$ 与离子 v_{HFS_1} 、靶原子 v_{HFS_2} 及 $F(z_1, z_2, M_1, M_2)$ 有关,考虑到入射离子在靶中运动时,其外层电子既可纳入离子的基本轨道,也可与靶原子中的电子相互“杂化”,在离子周围形成一个极化的电子云,从而增加了能量损失。在文献[1]中引入有效原子序数 z_{eff} 概念,定义为原子序数 z 的 m 倍,即 $z_{\text{eff}} = mz$, 于是(6)式的一般形式为

$$S_e(E) = F(v_{\text{HFS}_1}, v_{\text{HFS}_2}, z_{\text{eff}_1}, z_{\text{eff}_2}, M_2, d_2, v). \quad (12)$$

文献[1]对质子注入系统作归一化处理,得到

$$\frac{S_e(E)}{S_e(E)_p} = \frac{m^2 z_1^2}{m_p^2}. \quad (13)$$

(13)式表示同一能量下,离子 z_1 注入到靶 z_2 的 $S_e(E)$ 与质子注入到同一靶 z_2 的 $S_e(E)_p$ 的比值等于离子 z_1 的有效电荷和质子的有效电荷之比的平方(质子的 $z_1 = 1$)。式中 m , m_p 为 z_1 离子和质子的有效原子序数的比例系数。其值可查阅文献[1]。

(13)式虽使 $S_e(E)$ 与 $S_e(E)$ 联系了起来,但仍未与 v_{HFS} 联系,故仍表现不出周期振荡性。由于电子云“杂化”问题极为复杂,难以从理论上推导,根据文献中大量数据,我们提出(13)式的改进形式为

$$\frac{S_e(E)}{S_e(E)_p} = \frac{m_w^2 z_1^2 v_{\text{HFS}_1}^{1/2}}{m_p^2}, \quad (14)$$

式中

$$m_w = 1 - A \exp(-Bv_r). \quad (15)$$

当 $\mu^{1/6} = \left(\frac{M_2}{M_1} \right)^{1/6} < 1.111$ 时,

$$A = 0.12994\mu^{-1/6} + 0.8902, B = 1.316\mu^{-1/6} - 0.2528;$$

当 $\mu^{1/6} \geq 1.111$ 时,

$$A = 0.08557\mu^{-1/6} + 0.95224, B = 1.316\mu^{-1/6} - 0.2528. \quad (16)$$

这里

$$v_r = \left(\frac{v}{v_0} \right) z_1^{-2/3} u_{\text{HFS}_2}^{1/6}. \quad (17)$$

(17) 式中的 u_{HFS_2} 如同(4)式说明一样, 表示为归一化的 Hartree-Fock Slater 势能.

据此, $S_e(E)$ 与 v_{HFS_1} , u_{HFS_2} , z_{eff_1} 和 z_{eff_2} 等均有关, 符合(13)式的表式. 一旦 z_1 , z_2 , M_1 , M_2 , v_{HFS} 等已知, 结合已知的 $S_e(E)_p$, 即可由(14)式算得 $S_e(E)$ 值. 若将此 $S_e(E)$ 作为基准 $S_e(E)_B$, 则其它离子-靶体系的 $S_e(E)$ 值即可计算.

四、计算结果与讨论

文献[12]详尽计算并列表指出 v_{HFS} 按原子周期律变化而变化, 根据(4)–(10)式, γ 值和 β 值也应有周期性振荡, 从而引起 $S_e(E)$ 的周期振荡, 利用(9)和(11)式, 对 $v/v_0 = 0.91$, 0.63 和 0.411 时各种 z_1 离子注入 C 靶, 以及 $v/v_0 = 0.411$ 时 z_1 注入 Al 靶作了 $S_e(E)$ 的计算, 与实验值一起分别示于图 1 和图 2 (在计算三种 v/v_0 下的 C 靶中, 基准值取 $z_1 = 8$ 的 $S_e(E)_B = 70, 52$ 和 30; 而对 Al 靶, 取 $\text{C}^+ \rightarrow \text{Al}$ 的 $S_e(E)_B = 38.5$). 由图可见, 无论是趋势还是绝对值, 计算结果与实验值很一致. 这说明了 β 计算方法的可靠性, 同时也证实了 z_1 振荡与离子最外层的电子结构有关. 文献[15]指出, 当电子为满壳层时, 即当 z 为 2, 10, 18, 30, 48... 时, v_{HFS} 为最小; z_1 为其它值时, v_{HFS} 值随 z 增加而增加, 如此周而复始形成周期性振荡, 与图 1 和图 2 所示结果相一致.

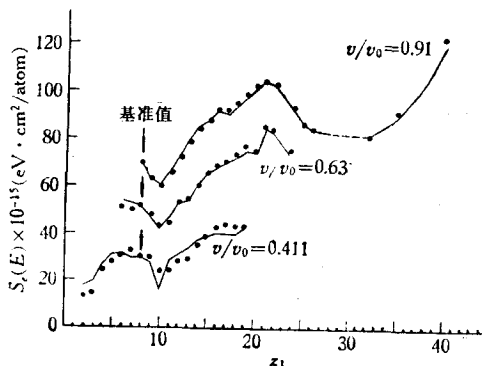


图 1 各种能量下 C 靶中 z_1 振荡

——本文按(9)和(11)式的计算值;
● $v/v_0 = 0.411$ 为文献[13], $v/v_0 = 0.63$
为文献[14], $v/v_0 = 0.91$ 为文献
[8]的实验值

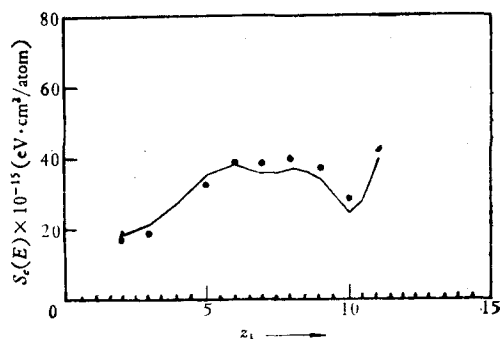


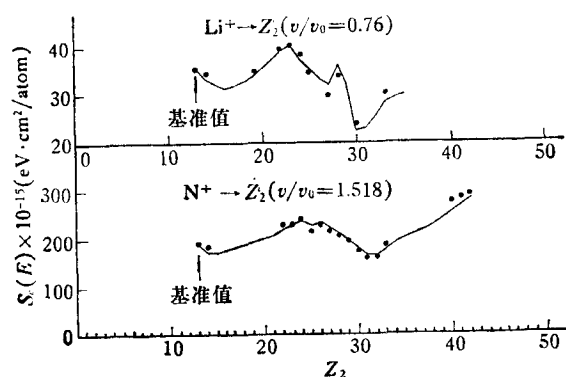
图 2 $v/v_0 = 0.411$ 下 Al 靶中 z_1 振荡

——本文按(9)和(11)式的计算值;
● 文献[13]的实验值

图 1 中, 三种能量下的曲线变化规律几乎一致, 表明振荡规律与能量无关, 而只与 v_{HFS} 有关, 支持了我们可采用与能量无关的归一化 β 值来研究 $S_e(E)$ 的振荡性的观点.

对同一能量下同一离子注入不同靶中, 可利用(10)和(11)式来计算 $S_e(E)$ 随 z_2 振荡, 图 3 系 $\text{Li}^+ \rightarrow z_2$ 和 $\text{N}^+ \rightarrow z_2$ 的计算结果, 计算中 $S_e(E)_B$ 分别取 $\text{Li}^+ \rightarrow \text{Al}$ 和 $\text{N}^+ \rightarrow \text{Al}$ 的值为 35 和 186.6. 由图 3 可见, 无论趋势还是绝对值, 计算结果与实验值较为符合. 计算结果再一次证明(9)–(11)式的适用性.

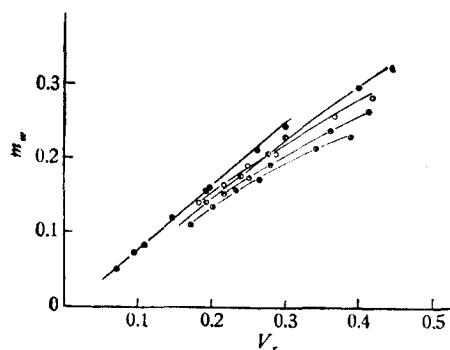
应当指出, 本文只计算到 $z \sim 40$ 的振荡, 并与实验作了比较, 证明(9)–(11)式是适用的, 但对 z 更大的元素, 由于缺乏实验值而无法比较, 计算方法是否仍适用, 有待以后研

图3 $\text{Li}^+ \rightarrow z_2$, $\text{N}^+ \rightarrow z_2$ 系统中 z_2 振荡

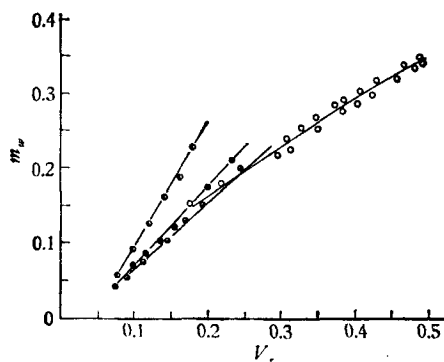
——本文按(10),(11)式的计算值;
 ● $\text{Li} \rightarrow z_2$ 文献[11]、 $\text{N}^+ \rightarrow z_2$ 文献[16]实验值

究。

现在讨论(14)–(17)式的适用性。首先,应用文献[17]的 $\text{O}^+ \rightarrow \text{C}$, Al , Ni , Ag 和 Au 靶的 $S_e(E)$ 值,由(17)式算出 m_w 值,由 v 和(17)式算出 v_r ,作 m_w 与 v_r 的关系示于图4(实验点)。图4中实线即(15)式,其中用了(16)式的 A 和 B 值。用同样方法,计算了文献[18] $\text{u}^+ \rightarrow \text{C}$ 靶和 Br^+ , u^+ , $\text{I}^+ \rightarrow \text{Au}$ 靶的 m_w 值,与 v_r 作图示于图5(实验点),实线由(15)和(16)式算出。

图4 O^+ 注入各种靶中 v_r 对 m_w 关系

——本文按(15),(16)式的计算值;实验点 m_w 和 v_r 由 $S_e(E)$ 和 v 的实验[17]按(14)和(17)式算出
 ● 为 $\text{O}^+ \rightarrow \text{C}$; ● 为 $\text{O}^+ \rightarrow \text{Al}$; ○ 为 $\text{O}^+ \rightarrow \text{Ni}$;
 ● 为 $\text{O}^+ \rightarrow \text{Ag}$; ● 为 $\text{O}^+ \rightarrow \text{Au}$

图5 各系统中 v_r 对 m_w 关系

——本文按(15)和(16)式的计算值;实验点根据文献[18]算出(参见图4注释);
 ● 为 $\text{u}^+ \rightarrow \text{C}$; ● 为 $\text{u}^+ \rightarrow \text{Au}$;
 ○ 为 $\text{Br}^+ \rightarrow \text{Au}$; ● 为 $\text{I}^+ \rightarrow \text{Au}$

图4和图5的结果,(14)–(17)式既适用于重离子注入于较轻靶(如 $\text{u}^+ \rightarrow \text{C}$),也适用于较轻离子注入重原子靶(如 $\text{C}^+ \rightarrow \text{Au}$),能量范围从几百 keV 到几百 keV,对于更小能量范围,由于核阻止本领的影响,是否适用还有待验证。

由(16)式, A , B 值与注入离子和靶原子的质量比 μ 值有关,文献[1]视为常数,可能只在特例或较近似估计时才能适用。

(14)–(17)式和图4、图5的结果还表明,随着注入能量增加, μ 变小,则 m_w 增加,

两原子间电子交换和电子轨道“杂化”的可能性增加,从而引起注入离子能量损失增大.至于较重离子注入较轻靶中,所得 m_w 大得多,可用重离子外层电子较多,因此“杂化”可能性就较大.由此,(16)式中 A 和 B 值可以用来衡量“杂化”程度.此外,(14)–(17)式还显示离子 v_{HFS_1} 和靶原子归一化的势能函数 u_{HFS_2} 越大, $S_e(E)$ 也越大.图 4 中 $\text{O}^+ \rightarrow \text{Ni}$, $v_r \leq 0.2$ 时 m_w 反而大于 $\text{O}^+ \rightarrow \text{Al}$ 的 m_w ,甚至可能大于 $\text{O}^+ \rightarrow \text{C}$ 的 m_w ,这一反常情况就是由于 u_{HFS_2} 起作用的缘故.

图 6 表示 O^+ 注入各种靶的 $S_e(E)$ 随 v/v_0 变化的关系,实验点取自文献 [8, 13, 14, 17],实线按(14)–(17)式算出.图 7 表示为 C^+ 注入各种靶的类似情况,实验结果取自文献 [17],计算方法相同.

根据图 6 和 7 计算的结果与实验值相当符合.可以认为计算方法是适用的 (14)–(17)式关系的建立,为我们计算 $NS_e(E) = KE^p$ 的 p 值提供了一条途径,对 R_p 和 ΔR_p 的计算也是十分有益的.

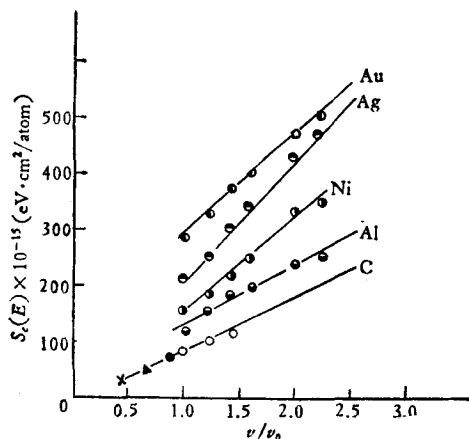


图 6 O^+ 注入各种靶中 v/v_0 对 $S_e(E)$ 的关系

——本文按(14)–(17)式的计算值
 $\bullet, \circ, \odot, \ominus, \otimes$ 取自文献 [17]; $\bullet$ 取自文献 [8];
 $\blacktriangle$ 取自文献 [14]; $\times$ 取自文献 [13]

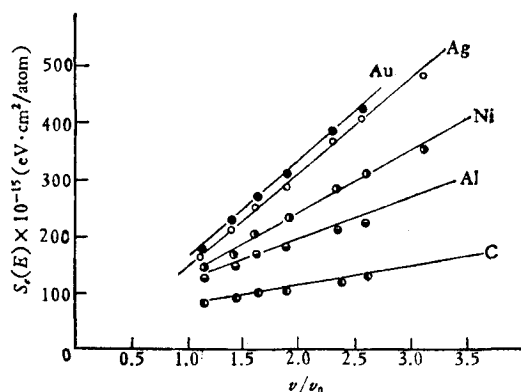


图 7 C^+ 注入各种靶中 v/v_0 对 $S_e(E)$ 关系

——本文按(14)–(17)式的计算值
 $\bullet, \circ, \odot, \ominus, \otimes$ 取自文献 [17]

参 考 文 献

- [1] M. D. Brown, C. D. Moak, *Phys. Rev. B: Solid State*, **6**(1972), 90.
- [2] 王德宁、程兆年、王渭源, *物理学报*, **29** (1980), 1452.
- [3] J. F. Gibbons, *Projected Range Statistics in Semiconductor* (Dowden Ross and Hutchinson Publishers, Stroudsburg, Pa, 1973).
- [4] J. Lindhard *et al.*, *Vidensk. Mat-Fys. Meddr.*, **33**(14) (1963), 1.
- [5] J. S. Briggs. *et al.*, *Atomic Collisions in Solid*, **1** (Plenum Press, New York and London, 1975), p. 15.
- [6] J. F. Gibbons, *Proc. IEEE*, **56**(3) (1968), 295.
- [7] W. Brandt, *ibid* [5], p. 261.
- [8] W. Pietsch *et al.*, *Nucl. Instr. and Method*, **132**(1976), 79.
- [9] J. C. Eckardt *et al.*, *Rad. Eff.*, **27**(1976), 79.
- [10] H. E. SCHJØTT, *Ion Implantation* (Gordon and Science publishers New York, 1976), p. 197.
- [11] F. Bernhard, *et al.*, *Phys. Stat. Sol.*, **35**(1969), 285.
P. Apel, *Phys. Stat. Sol. (a)*, **3**(1970), K173.

- [12] F. Herman *et al.*, Atomic Structure Calculations (Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs, New Jersey, 1963).
- [13] H. Ahmed *et al.*, *Phys. Rev.*, **173**(2) (1968), 454.
- [14] B. Fasturp *et al.*, *Can. J. Phys.*, **46**(1968), 498.
- [15] H. Ahmed, *Phys. Rev.*, **173**(2)(1968), 454.
- [16] D. J. Land, *et al.*, *ibid.*, [8], p. 89.
- [17] D. I. Porat, K. Ramavatham, *Proc. Phys. Soc.*, **77**(493)(1961), 97.
- [18] C. D. Moak *et al.*, *ibid.*, [5], p. 58.

CALCULATION OF THE z OSCILLATION OF ELECTRONIC STOPPING POWER

WANG DE-NING WANG WEI-YUAN

(Shanghai Institute of Metallurgy, Academia Sinica)

ABSTRACT

Using Hartree-Fock-Slater potential instead of Thomas-Fermi potential, a normalized formula of electronic stopping power is derived. Combined with the idea of effective atomic number, a correlate formula of electronic stopping power $S_e(E)$ and energy is obtained. The oscillation of $S_e(E)$ with atomic number of ions or target atoms are quantitatively calculated on the basis of the former formula. The results coincide well with experimental data in the literature. By using the later formula, the $S_e(E)$ of a variety of ion-target systems are quantitatively calculated. As compared with the formula in reference [1], the present results agree more satisfactorily with the experimental values and fit a broader range of energy.