

无定形靶中离子注入的 $R, R_p, \Delta R_p$ 的理论计算

王德宁 程兆年 王渭源

(中国科学院上海冶金研究所)

1980 年 1 月 8 日收到

提 要

本文在 Thomas-Fermi 势能基础上,导出了全射程 R 的解析解:

$$R = \frac{2}{a} \left[E^{1/2} - A_1 \left(\operatorname{arctg} \frac{2E^{1/2} - f}{\sqrt{\Delta}} + \operatorname{arctg} \frac{f}{\sqrt{\Delta}} \right) + B_1 \ln \frac{(E^{1/2} - f)^2}{E - fE^{1/2} + d} \cdot \frac{d}{f^2} \right],$$

其中 A_1, B_1, a, f, d 和 Δ 均为与离子及靶的质量、原子序数有关的常数。结合导出的 $\eta =$

$\frac{R}{R_p}$ (R_p 指投影射程) 比值的双曲函数关系

$$\eta = F(\mu) \left[A_2(\mu) + \frac{B_2(\mu)}{e^{1/2} + C} \right], \text{ 和 } \omega = \frac{R_p}{\Delta R_p}$$

(ΔR_p 指投影射程的标准偏差) 比值的线性关系 $\omega = A_3(\mu)e^{1/2} + B_3(\mu)$, 可简便而又准确地计算 $R, \Delta R_p, R_p$ 。这里 $F(\mu), A_2(\mu), B_2(\mu), B_3(\mu)$ 和 $A_3(\mu)$ 为 μ 的代数函数, μ 为离子与靶的质量比, C 是经验常数。并对 η 等关系式的物理意义作了讨论。

上述公式的计算结果与 Gibbons 的数值解结果及有关实验结果作了比较, 表明可用于元素半导体如 Si、二元化合物如 GaAs 以及三元化合物如 SiO_2 等; 既对较轻离子适用, 也对重离子适用, 具有一定的普适范围。

一、引 言

半导体离子注入技术, 已经越来越受到人们的重视。作为一种新的掺杂技术, 需要知道两个基本参数 $R_p, \Delta R_p$ 。对此, 有 LSS^[1] 的理论, Gibbons^[2] 的详细计算, 以及 Brice^[3] 等作的许多工作。但由于计算过程十分繁复, 一般均需用数值方法求解, 甚为不便。本文目的在于希望通过数学逼近和推导, 得出 $S_n(E), R$ 等的解析解, 结合推导、逼近得出的 $R/R_p, R_p/\Delta R_p$ 关系式, 从而能够较简单而又准确计算 R_p 和 ΔR_p 。计算适用于 Si 等元素半导体、GaAs 等二元化合物以及 SiO_2 等三元化合物也适用于重、轻离子, 有一定普适性。计算结果与文献数值计算结果和实验值相当符合。

二、理论推导与数学逼近

1) $S_n(E), R$ 的表示式

许多文献^[1-4] 详细地阐述了离子注入靶中的过程。归纳起来可认为注入时有两种能

量损失: 离子与靶核的弹性碰撞损失 $S_n(E)$; 离子与靶原子的电子的非弹性碰撞损失 $S_e(E)$, 一般可表示为 $NS_n(E) = C_{NSE}E^p$ (大多数情况下 $p = 1/2$), 这里 C_{NSE} 为电子阻止常数^[2]. 则单位距离上能量损失和全射程分别为

$$-\frac{dE}{dx} = \sum_k N_k [S_{n_k}(E) + S_{e_k}(E)], \quad (1)$$

$$R = \int_0^R dx = \int_0^E \frac{dE}{\sum_k N_k [S_{n_k}(E) + S_{e_k}(E)]}. \quad (2)$$

这里 x 是离子行经的距离, N_k 是靶第 k 个元素的原子密度, 对单元素靶, 则 $k = 1$. $S_n(E)$ 按文献 [4]

$$NS_n(E) = N \int_0^{T_m} T_n d\sigma_n. \quad (3)$$

在此 T_n 是离子对靶核碰撞时的转移能, T_m 是 T_n 的最大值, 即两者对头碰撞时的 T_n 值:

$$T_m = \gamma E, \quad \gamma = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2},$$

M_1, M_2 分别为离子、靶原子的质量, $d\sigma_n$ 为核的微分碰撞截面.

根据文献 [5], 在 Thomas-Fermi 位势下, $d\sigma_n$ 可表示如下:

$$d\sigma_n = \frac{\pi a_{TF}^2 f_{TF}(t^{1/2}) dt}{2t^{3/2}}, \quad (4)$$

式中 a_{TF} 为 T-F 屏蔽半径, $t = C_e^2 E T_n / \gamma$, 亦即 $T_n = \frac{\gamma t}{C_e^2 E}$, 当 $T_n = T_m = \gamma E$ 时, 有 $t_m = C_e^2 E^2 = \epsilon^2$, 并且^[5]

$$f_{TF}(t^{1/2}) = \frac{\lambda t^{1/2-m}}{[1 + (2\lambda t^{1-m})^q]^{1/q}}.$$

仿照 Gibbons^[2], 取 $\lambda = 1.309$, $m = 1/3$, $q = 2/3$, 于是

$$NS_n(E) = N \int_0^{\gamma E} T_n d\sigma_n = \frac{\lambda C_\rho}{2C_e^2 E} \int_0^{\epsilon^2} \frac{dt}{t^{1/3} [1 + (2\lambda t^{2/3})^{2/3}]^{3/2}}, \quad (5)$$

式中 $C_\rho = 2\pi N r a^2$, 作变量代换, 令 $v = (2\lambda)^{2/3}$, $z = 1 + vt^{4/9}$, 则 (5) 式的积分结果为

$$NS_n(E) = \frac{C_\rho}{C_e^2 E} \cdot \frac{9}{16} \left\{ \ln [2(1 + v\epsilon^{8/9}) + 2\sqrt{v\epsilon^{8/9}(1 + v\epsilon^{8/9})} - 1] - 2\sqrt{1 + \frac{v\epsilon^{8/9}}{1 + v\epsilon^{8/9}}} \right\}. \quad (6)$$

记

$$L = \frac{9}{16} \left\{ \ln [2(1 + v\epsilon^{8/9}) + 2\sqrt{v\epsilon^{8/9}(1 + v\epsilon^{8/9})} - 1] - 2\sqrt{1 + \frac{v\epsilon^{8/9}}{1 + v\epsilon^{8/9}}} \right\},$$

L 仅为 ϵ 的函数, 以 L 对 $\epsilon^{1/2}$ 作数学逼近示于图 1. 逼近的结果为: 当 $\epsilon^{1/2} \leq 2.5$ 时, $L = 0.467\epsilon^{1/2} - 0.13$; 当 $\epsilon^{1/2} > 2.5$ 时, $L = 0.208\epsilon^{1/2} + 0.522$. 可合记为 $L = m\epsilon^{1/2} + n$, 于是

1) 这里 a_{TF} , C_e , C_ρ 计算可参考文献 [2].

(2) 式可改写为

$$R = \int_0^E \frac{dE}{C_{\text{NSE}} E^{1/2} + \frac{C_p}{C_e^2} E (m\epsilon^{\frac{1}{2}} + n)}.$$

若记

$$a = C_{\text{NSE}}, \quad b = \frac{mC_p}{aC_e^{3/2}}, \quad C = \frac{nC_p}{aC_e^2},$$

则上式变为

$$R = \frac{2}{a} \int_0^E \frac{E^{3/2} dE^{1/2}}{E^{3/2} + bE^{1/2} + C}.$$

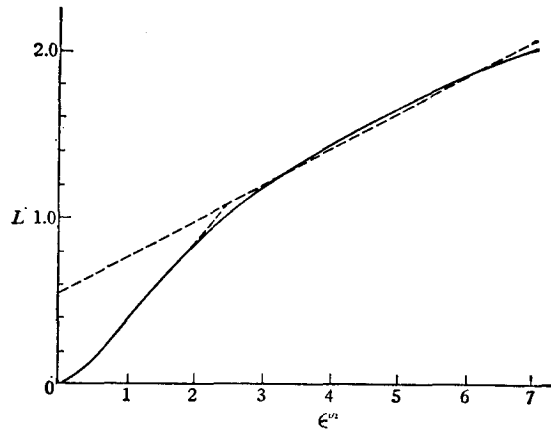


图1 $L-\epsilon^{1/2}$ 关系

积分式内

$$\begin{aligned} \frac{E^{3/2} dE^{1/2}}{E^{3/2} + bE^{1/2} + C} &\equiv \frac{x^3 dx}{x^3 + bx + C} = \left(1 - \frac{bx + C}{x^3 + bx + C}\right) dx \\ &= \left[1 - \frac{bx + C}{(x+f)(x^2 - fx + d)}\right] dx = \left[1 - \frac{b}{x^2 - fx + d} \right. \\ &\quad \left. + \frac{bf - C}{(x+f)(x^2 - fx + d)}\right] dx, \end{aligned}$$

式中分解 $x^3 + bx + C$ 为 $(x+f)(x^2 - fx + d)^2$, 于是积分得

$$\begin{aligned} R = \frac{2}{a} &\left[E^{\frac{1}{2}} - A_1 \left(\operatorname{arctg} \frac{2E^{\frac{1}{2}} - f}{\sqrt{\Delta}} + \operatorname{arctg} \frac{f}{\sqrt{\Delta}} \right) \right. \\ &\left. + B_1 \ln \frac{(E^{\frac{1}{2}} - f)^2}{E - fE^{1/2} + d} \cdot \frac{d}{f^2} \right], \end{aligned} \quad (7)$$

其中

1) $x^3 + bx + C = (x+f)(x^2 - fx + d) = x^3 + (d - f^2)x + fd$, 即 $d - f^2 = b$, $fd = C$, 于是有关 f 的三次方程 $f^3 + bf - C = 0$, 其解为 $f = -2r \operatorname{sh} \frac{\varphi}{3}$, 式中 $r = \sqrt{\frac{b}{3}}$, $\operatorname{sh} \varphi = \frac{e^\varphi - e^{-\varphi}}{2} = \frac{(C/2)}{r^3}$ (r 与 C 同号), 而 $d = C/f$.

$$\Delta = 4d - f^2, \quad A_1 = \frac{2}{\sqrt{\Delta}} \left(b + \frac{3f(C - bf)}{2(d + 2f^2)} \right), \quad B_1 = \frac{bf - C}{2(d + 2f^2)}.$$

对于二元化合物或多元化合物,

$$a = \sum_k C_{\text{NSE}_k}, \quad b = \frac{m}{a} \sum_k \frac{C_{\rho,k}}{C_{\epsilon,k}^{3/2}},$$

$$C = \frac{n}{a} \sum_k \frac{C_{\rho,k}}{C_{\epsilon,k}^2},$$

在 $\epsilon < 2.5$ 时, 可直接使用 (7) 式, 并取 $m = 0.467$, $n = 0.13$, 只要 ϵ 不是十分小, 计算精度甚好. 在 $\epsilon > 2.5$ 时,

$$R = \int_0^E \frac{dE}{C_{\text{NSE}} E^{\frac{1}{2}} + \frac{C_{\rho}}{C_{\epsilon}^2} (m\epsilon^{\frac{1}{2}} + n)} = \int_0^{2.5/C_{\epsilon}} \frac{dE}{C_{\text{NSE}} E^{\frac{1}{2}} + \frac{C_{\rho}}{C_{\epsilon}^2} (0.467\epsilon^{\frac{1}{2}} - 0.13)} \\ + \int_{2.5/C_{\epsilon}}^E \frac{dE}{C_{\text{NSE}} E^{\frac{1}{2}} + \frac{C_{\rho}}{C_{\epsilon}^2} (0.208\epsilon^{\frac{1}{2}} + 0.522)} = R_1 + R_2.$$

这里 R_1 , R_2 均可用 (7) 式表示, 适用范围可达 $\epsilon < 50$.

2) R_p 的计算

令 $\eta = R/R_p$, 虽然用 Thomas-Fermi 位势无法得到 η 的解析式, 然而在 $\nabla(r) \sim r^2$ 位势下, 却可得到 $\eta = \eta(\epsilon, \mu)$ 的解析式. 一旦 $\eta(\epsilon, \mu)$ 求得, 结合 (7) 式可得 R_p . 因为 $\eta = R/R_p = \rho/\rho_p$, 式中

$$\rho = C_{\rho} R = C_{\rho} \int_0^E \frac{dE}{N[S_c(E) + S_n(E)]} = \int_0^{\epsilon} \frac{d\epsilon}{\frac{C_{\epsilon}}{C_{\rho}} NS_c(E) + \frac{C_{\epsilon}}{C_{\rho}} NS_n(E)}$$

为电子阻止本领, 根据文献 [2],

$$\frac{C_{\epsilon}}{C_{\rho}} NS_c(E) = 0.0793 z_1^{1/6} \sqrt{\frac{z_1 z_2 (M_1 + M_2)^3}{z M_1^3 M_2}} \epsilon^{\frac{1}{2}} = K \epsilon^{\frac{1}{2}}.$$

由于 $z_1^{1/6}$ 变化缓慢, 又因 $z_2/z_1 = M_2/M_1 = \mu$, 故可近似视 K 为 μ 的函数 $K = K(\mu)$. 另外, 核阻止本领在 r^{-2} 位势下, 根据文献 [2],

$$\frac{C_{\epsilon}}{C_{\rho}} NS_n(E) = \alpha = 0.327,$$

因此

$$\rho = \int_0^{\epsilon} \frac{d\epsilon}{K(\mu)\epsilon^{\frac{1}{2}} + \alpha} = \frac{2}{K(\mu)} \epsilon^{\frac{1}{2}} - \frac{2\alpha}{K^2(\mu)} \ln \left(1 + \frac{K(\mu)}{\alpha} \epsilon^{\frac{1}{2}} \right). \quad (8)$$

另外, 不考虑电子阻止时, 在 r^{-2} 位势下, 按 Sanders^[4] ρ_{np} 有解析解, 可写为

$$\rho_{np} = \alpha_p(\mu)\epsilon.$$

类似于

$$R = \int_0^E \frac{dE}{NS(E)},$$

可定义 $S_{np}(E)$, 使不考虑电子阻止时,

$$R_p = \int_0^E \frac{dE}{S_{np}(E)N}.$$

因此, 由 ρ_{np} 可反推得 S_{np} , 即

$$\frac{C_\epsilon}{C_\rho} NS_{np}(E) = \alpha'_p(\mu), \quad \alpha'_p(\mu) = \frac{1}{\alpha_p(\mu)}.$$

由于电子阻止不产生角散射, 故按阻止本领之可加性,

$$\begin{aligned} \rho_p &= \int_0^\epsilon \frac{d\epsilon}{\frac{C_\epsilon}{C_\rho} NS_\epsilon(E) + \frac{C_\epsilon}{C_\rho} NS_{np}(E)} = \int_0^\epsilon \frac{d\epsilon}{K(\mu)\epsilon^{1/2} + \alpha'_p(\mu)} \\ &= \frac{2}{K(\mu)} \epsilon^{\frac{1}{2}} - \frac{2\alpha'_p(\mu)}{K^2(\mu)} \ln \left(1 + \frac{K(\mu)}{\alpha'_p(\mu)} \epsilon^{\frac{1}{2}} \right). \end{aligned} \quad (9)$$

将对数函数作如下近似展开:

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \dots \quad (10)$$

可得到 η 的表式为

$$\eta = \frac{a'(\mu)\epsilon^{\frac{1}{2}} + b'(\mu)}{a''(\mu)\epsilon^{1/2} + b''(\mu)} = A(\mu) + \frac{B(\mu)}{\epsilon^{1/2} + C(\mu)}. \quad (11)$$

我们取用 $\eta(\epsilon, \mu)$ 的函数形式 (11), 对其中参数按数值解的结果及实验值进行数学逼近, 在作数学逼近时看到 $C(\mu)$ 随 μ 变化缓慢, 为了简便, 取 $C(\mu) = C = \text{常数}$. 并且为了与文献 [7] 中的 $\eta = F(\mu)$ 作比较, η 可写为

$$\eta = F(\mu) \left[A_2(\mu) + \frac{B_2(\mu)}{\epsilon^{1/2} + C} \right], \quad (12)$$

其中逼近所得到的 C , $A_2(\mu)$ 和 $B_2(\mu)$ 分别为

$$\begin{aligned} C &= 0.88, \quad A_2(\mu) = 1.465 - 0.739\mu^{\frac{1}{3}}, \\ B_2(\mu) &= \frac{0.524\mu^{4/3} - 1.04\mu - 0.048\mu^{\frac{1}{3}} + 0.095}{0.747\mu - 1}, \end{aligned}$$

而

$$F(\mu) = \frac{1}{4} \left[-1 - 3\mu + \frac{(5+\mu)(1+\mu)}{2\sqrt{\mu}} \arccos \frac{1-\mu}{1+\mu} \right]. \quad (13)$$

当电子阻止本领甚大于核阻止本领时, (11) 式误差变大, 因此该半经验公式在入射离子过轻或能量过高时适用性变差.

3) ΔR_p 的计算

令 $\omega = R_p / \Delta R_p$, 则 $\Delta R_p = R_p / \omega$, 与 η 相同, 在 $V(r) \sim r^2$ 位势下, 可以由 ρ_p , $\Delta \rho_p$ 算得 ω . 在不考虑电子阻止下, Sanders^[4] 给出

$$\Delta \rho_p = \sqrt{\rho_p^2 - \bar{\rho}_p^2} = \sqrt{\frac{1}{3} \delta(\mu) + \frac{2}{3} \nu(\mu) - \alpha_p^2(\mu) \epsilon}.$$

结合 (9) 式可计算 ω . 同样地, 对 (9) 式按 (10) 式作近似展开, 就可将 ω 表示为如下形

式:

$$\omega = A_3(\mu)e^{\frac{1}{2}} + B_3(\mu). \quad (14)$$

逼近得到

$$A_3(\mu) = 0.748 + 0.762\mu^{\frac{1}{3}}; \quad B_3(\mu) = 2.38 - 0.86\mu^{\frac{1}{2}}.$$

三、计算结果与讨论

(1) 关于 R 本文所作分段逼近 $L = m\epsilon^{\frac{1}{2}} + n$, 使 R 的计算有了解析解. 计算结果

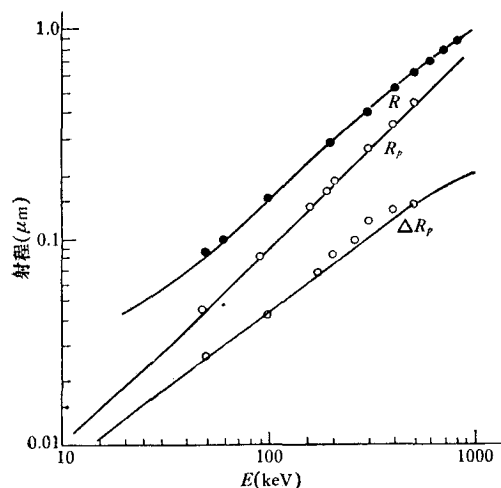


图2 Si^+ 注入 GaAs 中的射程

○ 为文献 [8] 实验值; ● 为 Gibbons 计算值(下同); — 为本文计算值(下同)

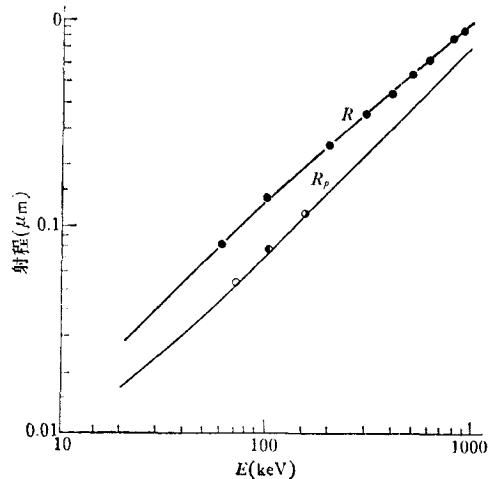


图3 S^+ 注入 GaAs 中的射程

○ 为文献 [9] 实验值; ● 为文献 [11] 实验值; — 为本文计算值

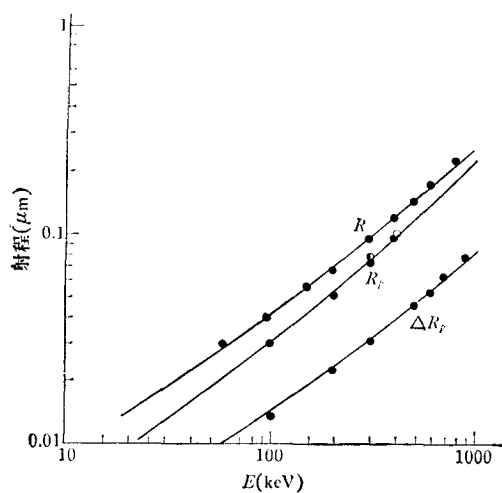


图4 Sn^+ 注入 GaAs 中的射程

● 为文献 [21] 实验值

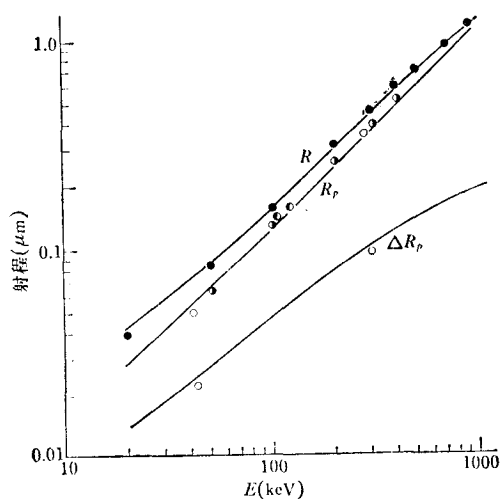
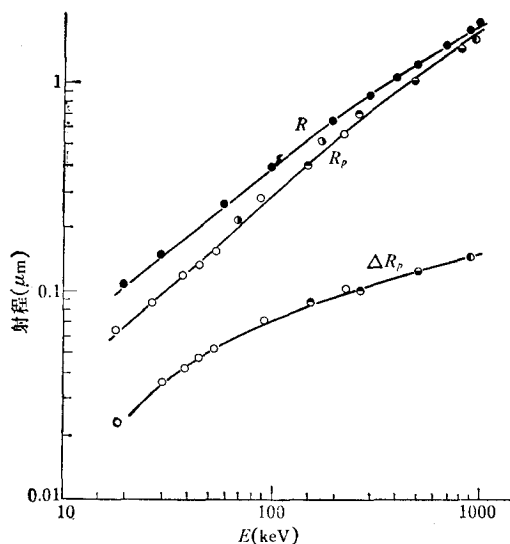
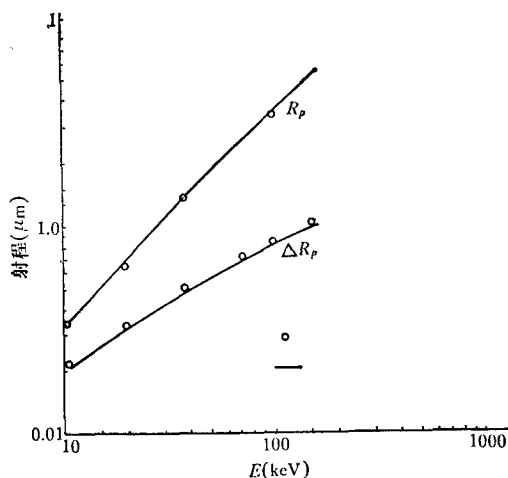


图5 P^+ 注入 Si 中的射程

○ 为文献 [18] 实验值; ● 为文献 [19] 实验值; ● 为文献 [17] 实验值

图 6 B^+ 注入 Si 中的射程

○ 为文献[12]实验值; ● 为文献[13]实验值;
 ● 为文献[14]实验值; ● 为文献[15]实验值;
 ● 为文献[16]实验值

图 7 B^+ 注入 SiO_2 中的射程

○ 为文献[12]实验值

示于图 2—7 中, 与 Gibbons^[2] 的数值解几乎完全一致. 计算结果表明, (7) 式不仅适用于元素靶 (如 Si), 二元化合物靶 (如 GaAs), 还适用于多元化合物靶 (如 SiO_2). 它不仅适用于重离子 (如图 4, $Sn^{+} \rightarrow GaAs$), 还适用于较轻离子 (如图 6, $B^{+} \rightarrow Si$; 图 7, $B^{+} \rightarrow SiO_2$). 能量范围可从 20 至 1000 keV.

(7) 式的物理意义显然比较明确. 在离子注入中, 如果只考虑电子阻止的影响, 一般认为

$$R = \int_0^E \frac{dE}{C_{NSE} E^{1/2}} = \frac{2}{C_{NSE}} E^{1/2},$$

此即为 (7) 式中第一项. 据此, (7) 式中第二、三项将是核阻止对射程的影响. 式中 A_1 , B_1 , b , C 可称为与核阻止有关的常数, 某些例子的常数列于表 1. 由表 1 可见, B_1 总小于 A_1 , 且 $B_1 \ll A_1$, 它与对数的乘积也远小于第二项, 因此, 核阻止所引起的射程变化主要是第二项的贡献. 而且由表 1 可见, 离子越重 (即 μ 越小), 其 A_1 值越大, $S_n(E)$ 就越大, 故 A_1 值可用来量度 $S_n(E)$. $S_n(E)$ 越大, R 当然越小.

由于 (7) 式应用了 $S_e(E) = \frac{C_{NSE}}{N} E^{1/2}$, 故将不适用 $\mu \gg 10$ 情况, 如 $H^{+} \rightarrow GaAs$ ($\mu = 72.5$), Gibbons^[2] 采用 $S_e(E) = \frac{A(E/E_0)^p}{1 + B(E/E_0)}$. 此时, R 的计算显然不能用 (7) 式, 文献 [20] 对此作了讨论.

(2) 关于 R_p 和 η R_p 的计算与 R 密切相关. 一旦 R 求得, 按双曲线关系即 (12) 式, 可方便地算得 R_p . 图 2—7 分别将 (12) 式算得的 R_p 与诸文献所报道的实验值作了比较. 由图可见, 计算结果甚为满意, 表明 (12) 式有相当的普适性.

按 η 定义, $\eta = R/R_p$, R 是全射程, R_p 为投影射程. 因此 η 是离子角散射的统计度

表 1 与核阻止有关的常数

离子→靶	b		C		A_1		B_1	
	$\epsilon \leq 2.5$	$\epsilon > 2.5$	$\epsilon \leq 2.5$	$\epsilon > 2.5$	$\epsilon \leq 2.5$	$\epsilon > 2.5$	$\epsilon \leq 2.5$	$\epsilon > 2.5$
Si ⁺ →GaAs	136.3	59.86	-332.7	1314	11.49	8.37	+0.0165	-1.22
S ⁺ →GaAs	179.1	78.1	-478.6	1888.5	13.21	9.58	+0.046	-1.365
Sn ⁺ →GaAs	2171	—	-1522.7	—	46.2	—	+0.081	—
B ⁺ →Si	12.10	5.32	-10.05	39.67	3.445	2.56	+0.018	-0.400
P ⁺ →Si	208.8	91.4	-629.5	2481	14.27	10.41	+0.0556	-1.532
S ⁺ →SiO ₂	102.2	45.5	-188.2	743	10.05	7.17	+0.019	-0.974

量, 是散射角 ϕ 的统计函数, 试将 η 与 ϕ 作一类比. 文献 [6] 讨论了二粒子的弹性碰撞, 在 r^{-2} 的位势下, 质心坐标系下得到

$$\phi = \pi \left[1 - 1 / \sqrt{1 + \left(\frac{1}{\epsilon^{1/2}} \frac{\bar{a}}{P} \right)^2} \right],$$

其中 $\bar{a}$ 为屏蔽半径, P 为碰撞参数. 此式可改写为

$$\left(\frac{\pi}{\pi - \phi} \right)^2 - \left(\frac{1}{\epsilon^{1/2}} \frac{\bar{a}}{P} \right)^2 = 1,$$

这是一个典型的双曲线函数, 因此, 就不同 $\epsilon^{1/2}$ 值计算 ϕ 值, 可整理成

$$\phi = \frac{0.54\pi \frac{\bar{a}}{P}}{\left(\epsilon^{1/2} + 0.29 \frac{\bar{a}}{P} \right)} - 0.133\pi,$$

与 (12) 式完全相似, 图 8 给出了

$$\phi - \frac{1}{\left(\epsilon^{1/2} + 0.29 \frac{\bar{a}}{P} \right)}$$

的关系图.

图 9 给出了各种离子注入 GaAs 时的 $\eta - \frac{1}{(\epsilon^{1/2} + 0.88)}$ 的关系图. 由图 9 可见, 当 $\frac{1}{(\epsilon^{1/2} + 0.88)} \rightarrow 0.88$ 时, 所有直线均交于一公共点 $\eta = 1$. 这表明大部分离子注入 GaAs 时, 有一公共临界点 $\epsilon_0 = 135$, 在 $\epsilon \geq \epsilon_0$ 时, 有 $R \simeq R_p$, 由于 R 总大于 (或等于) R_p , 故 $\epsilon \leq \epsilon_0$ 时, (12) 式适用, 否则不适用. 利用 $\epsilon = \epsilon_0$ 时, $\eta = 1$, 得

$$\frac{1}{F(\mu)} = A_2(\mu) + 0.08B_2(\mu),$$

利用此式可作 $F(\mu)$, $A_2(\mu)$ 和 $B_2(\mu)$ 之间的换算, 计算可简便些. 此外, 文内我们用 GaAs 数据数学逼近得的 $A_2(\mu)$ 和 $B_2(\mu)$ 值, 直接应用于 Si, SiO₂ 靶, 结果也很适用 (见图 2 等 R_p 值), 表明这一临界点 $\epsilon_0 = 135$, 也可能适用于其他靶.

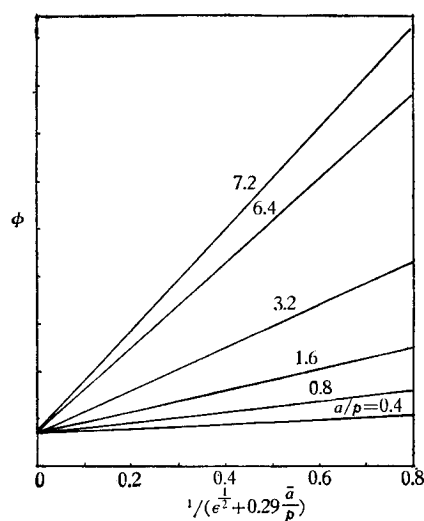


图 8 $\phi - \frac{1}{\epsilon^{1/2} + 0.29 \frac{a}{p}}$ 的关系

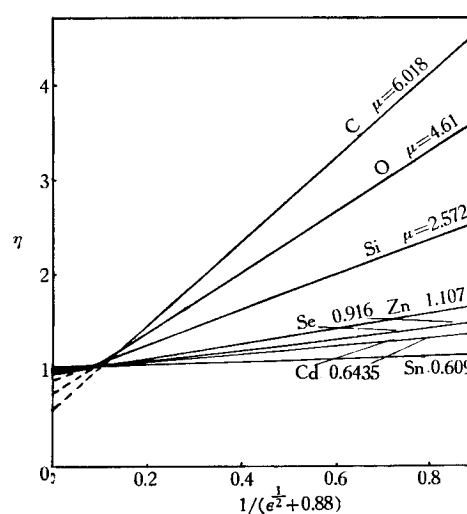


图 9 各种离子注入 GaAs 的 $\eta - \frac{1}{\epsilon^{1/2} + 0.88}$ 关系

$$\eta = f(\mu) \left[A(\mu) + \frac{B(\mu)}{\epsilon^{1/2} + 0.88} \right]$$

由(13)式, 当 $\mu \leq 0.24$ 时, $A_2(\mu) \doteq 1$, $B_2(\mu) \leq A_2(\mu)$, 因此 $\eta \doteq F(\mu)$, 与 Lindhard^[7] 的 $\mu \leq 0.4$ 时可取 $\eta = F(\mu)$ 的结论相符。

(3) 关于 ΔR_p 和 ωR_p 算出后, 按(14)式可求得 ΔR_p , 结果也示于表 1, 图 2 等中, (14)式是一半经验公式, 其物理意义还有待于进一步探讨, 但从实验结果相符的事实来看, 此式还是可适用的。

(4) 本文为了精确计算 R , 应用了 T-F 势, 在计算 η 时, 若用 T-F 势我们未能得出解析式, 因而应用了较简单的 r^{-2} 位势导出了 η, ω 等半经验关系式, 用精确的数值解结果与实验值定出半经验公式中的常数, 理论上还是允许的, 但未免有些欠缺, 还有待进一步工作。

最后, 上述所有关系式是否适用于两原子半径相差较大的化合物靶(如 CdS), 还值得探讨。因为许多化合物靶并不符合 Bragg 定律, 不存在简单的加和性

$$S(E) = \sum_i S_i(E).$$

本计算结果一般与实验值有 $\leq 10\%$ 的误差, 这可能与未考虑 z_1 或 z_2 振荡有关, 以 HFS 波函数代替 T-F 势更为合理, 这些都值得我们今后进一步工作的。

参 考 文 献

- [1] J. Lindhard *et al.*, Vidensk, *Mat-Fys. Meddr.*, **33**(14) (1963), 1.
- [2] J. N. Gibbons, "Projected Range Statistics in Semiconductors", (Dowden Ross and Hutchinson Publishers, Stroudsburg, Pa, 1973).
- [3] D. K. Brice, Sandia Laboratories Research Reports, SC-RR-710599, (Sep. 1971).
- [4] J. B. Sanders, *Can. J. Phys.*, **46**(1968), 445.
- [5] K. B. Winterbon *et al.*, *Mat. Fys. Medd. Vid. Selisk*, **37**(14) (1970), 72.
- [6] G. Dearnaley *et al.*, "Ion Implantation", (1968), 26.

- [7] J. Lindhard *et al.*, *Phys. Rev.*, **124**(1961), 128.
- [8] D. H. Lee, *Appl. Phys. Lett.*, **30**(7) (1977), 327.
- [9] Susuma, Namba, "Ion Implantations in Semiconductors", (Faculty of Engineering Science, Osaka University Toyonaka, Osaka, Japan), 19.
- [10] R. Feder, *Solid State Electronics*, **18**(4) (1975), 349.
- [11] R. W. Bicknell, "Ion Implantation", (1971), 256.
- [12] K. Wittmaack, *See* [9], p198.
- [13] W. K. Hofker, Proc. 3rd. Inter. Conf. On Ion Implantation in Semiconductors and other Material (Edited by B. L. Crowder, Plenum Press, New York), (1973), 133.
- [14] D. E. Davies, *Can. J. Phys.*, **47**(1969), 1750.
- [15] J. F. Ziegler, *Appl. Phys. Lett.*, **21**(1972), 16.
- [16] D. P. Leecrasnier, *IEEE Trans*, **ED-21**(1974), 113.
- [17] B. L. Crowder, "Ion Implantations in Semiconductors and Other Materials", (1974), 34
- [18] B. L. Crowder, *J. Electrochem. Soc.*, **18**(1971), 943.
- [19] B. L. Crowder, *See* [17], p77 and u81.
- [20] 王渭源等, 物理学报, **28**(1979), 684.
- [21] H. M. Hirata, *Acta Electronica*, (1976), 151.

THEORETICAL ESTIMATES OF R , R_p AND ΔR_p OF THE ION IMPLANTATION IN AMORPHOUS TARGETS

WANG DE-NING CHENG ZHAO-NIAN WANG WEI-YUAN

(Shanghai Institute of Metallurgy, Academia Sinica)

ABSTRACT

Based on Thomas-Fermi potential, we derived an analytical expression of the total range $R = \frac{2}{a} \left[E^{\frac{1}{2}} - A_1 \left(\arctg \frac{2E^{\frac{1}{2}} - f}{\sqrt{\Delta}} + \arctg \frac{f}{\sqrt{\Delta}} \right) + B_1 \ln \frac{(E^{\frac{1}{2}} - f)^2}{E - fE^{\frac{1}{2}} + d} \cdot \frac{d}{f^2} \right]$, where A_1, B_1, a, f, d , and Δ are constants related to mass and atomic number of the ion and the target. Combined with the derived hyperbolic relation $\eta = \frac{R}{R_p} = F(\mu)$.

$\left[A_2(\mu) + \frac{B_2(\mu)}{\epsilon^{\frac{1}{2}} + C} \right]$, and linear function $\omega = \frac{R_p}{\Delta R_p} = A_3(\mu)\epsilon^{\frac{1}{2}} + B_3(\mu)$, R , R_p and

ΔR_p can be calculated easily and accurately. Here, R_p and ΔR_p are project range and standard deviation respectively, C is an empirical constant, and $F(\mu)$, $A_2(\mu)$, $B_2(\mu)$, $A_3(\mu)$ and $B_3(\mu)$ are all algebraic functions of μ , the mass ratio of the ion and the target. By Comparing with numerical solutions of Gibbons et al. and experimental results published in literature, we conclude that our expressions can be used to both light or heavy ion implantation into Si, GaAs or SiO₂ target. The physical significance of our expression was discussed also.