

在 I 相, 做无规相近似, 可得

$$G_0 = \frac{\nu/g(\nu)}{1-\nu} \langle S_i^2 \rangle, \quad (11)$$

其中

$$\nu = \beta \Delta_{00} \bar{J}, \quad g(\nu) = \frac{1}{N} \sum_{p_{\perp}} \left(\frac{1}{\nu} - \langle J_{p_{\perp}} \rangle / \bar{J} \right)^{-1}. \quad (12)$$

把 (11) 式与文献 [6] 比较, 不同之处有二: (i) g 函数的具体形式不同; (ii) 文献 [6] 中 (25) 式的 J_0 是与分子长度无关的常数, 本文的 $\bar{J}$ 与分子长度 d 有关.

由 (11) 式给出的 $G_0^{-1}(T)$ 曲线在相变点附近向下弯曲, 与实验定性一致.

在二级近似下 I 相的结果为

$$G_0 = \left\langle \frac{-L_0}{1-J_0 L_0} \cdot \frac{\frac{1}{N'} \sum_{p_{\perp}} J_{p_{\perp}} N_{p_{\perp}} / (1-J_{p_{\perp}} L_{p_{\perp}})}{\frac{1}{N'} \sum_{p_{\perp}} 1/(1-J_{p_{\perp}} L_{p_{\perp}})} \right\rangle + \left\langle \frac{N_0}{1-J_0 L_0} \right\rangle. \quad (13)$$

(13) 式给出的 $G_0^{-1}(T)$ 曲线与 (11) 式给出的结果定性上一致. 即虽然 (13) 式中计及了一些短程序参数的影响, 但在相变点附近向下弯曲的特点并不因此而改变. 本工作中, 曾仔细考察了一级近似和二级近似下 $G_0^{-1}(T)$ 曲线二阶微分的符号, 结果表明: 不存在预示曲线开始向上凹的拐点.

四、同系物中的 Cotton-Mouton 系数

A. 实验结果

在外磁场中, 液晶的哈密顿量为

$$H = H_0 - h \sum_i S_i, \quad (14)$$

式中 H_0 表示外场为零时的哈密顿量, h 正比于磁场强度 B 的平方. 当存在外磁场时高温相的 Cotton-Mouton 系数

$$C = \delta n / B^2 = m_0 \langle S_i \rangle_H / h, \quad (15)$$

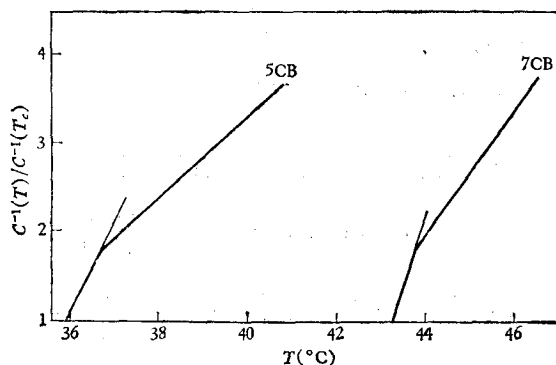


图 2 nCB 的 $[C(T)/C(T_c)]^{-1}$ 实验曲线^[7]

式中 m_0 为材料参数. $\langle \cdots \rangle_H$ 表示在 (14) 式的 H 量下的热平均. 显然 $C \equiv C(T)$ 是温度的函数.

在液晶同系物中, 不同的分子 m_0 也不同, 但 $C(T)/C(T_c)$ 则与 m_0 无关. 据此, 我们把 Muta 等人^[6]对液晶同系物 nCB , $nOCB$ Cotton-Mouton 系数的实验结果做了分析处理, 得到同系物中 Cotton-Mouton 系数随分子尾链中碳原子数 n 系统改变的关系: $[C(T)/C(T_c)]^{-1}$ 曲线在相变点附近向下弯折程度随 n 增加而减少(见图 2). 在文献[7]中 $C(T)$ 曲线图中是看不出这一趋势的. 液晶同系物的这个实验在本工作以前是没有理论解释的.

B. 理论计算

在弱磁场中, 把 $\langle S_i \rangle_H$ 对 h 展开, 有^[8]

$$\begin{aligned} \langle S_i \rangle_H &= \left(\frac{\partial \langle S_i \rangle_H}{\partial h} \right)_{h=0} h \\ &+ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \langle S_i \rangle_H}{\partial h^2} \right)_{h=0} h^2 + \cdots \\ &= \beta h G_0 + \frac{1}{2} \beta^2 h^2 \frac{1}{N} \\ &\quad \times \sum_{i,j,\mu} \langle S_i S_j S_\mu \rangle + \cdots \end{aligned} \quad (16)$$

如只保留第一项, 则有

$$C \approx m_0 \beta G_0, \quad (17)$$

即由关联函数 G_0 可以很容易得到 Cotton-Mouton 系数 C , 且

$$C(T)/C(T_0) = \frac{T_0}{T} G_0(T)/G_0(T_0). \quad (18)$$

对于 (6) 式假设下的 $F(d/r_0)$, 当 $\lambda = 2$ 时, T_{N1} 随 d 增加单调上升 (这正是 nCB 的情形), 沿用本文第三节中算得的 $G_0(T)$, 可以得到 $[C(T)/C(T_c)]^{-1}$ 曲线(见图 3). 图 3 中 a 线对应于 $d/r_0 = 2.4$, b 线对应于 $d/r_0 = 2.58$. 从图中可以明显看出: 随着分子长度 d 的增加, 曲线在相变点附近的弯折程度越来越小. 对于 $F(d/r_0)$ 的其它函数形式, T_c 与 d/r_0 的关系有相应改变, 但是图 3 中所显示的曲线弯折程度随 T_c 增加而减小这个特点不变.

把图 3 与图 2 加以比较, 可以看出理论的结果与实验结果是定性符合的.

五、表观指数

由文献[8]的(15)式, 表观指数 Δ ^[9] 由下式给出(这里的 Δ 即文献[9]中的 Δ):

$$A_2/A_1 \sim e^{-\Delta(\epsilon)}, \quad (19)$$

式中

$$A_1 = \beta G_0 \bar{J}, \quad A_2 = \frac{1}{2} \beta^2 \bar{J}^2 \frac{1}{N} \sum_{i,j,\mu} \langle S_i S_j S_\mu \rangle, \quad \epsilon = (T - T^*)/T^*. \quad (20)$$

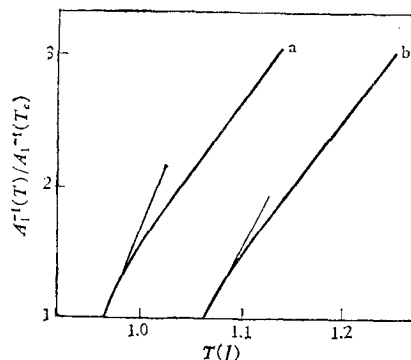


图 3 $[C(T)/C(T_c)]^{-1}$ 理论曲线
a, b 线分别对应于 $d/r_0=2.4, 2.58$;
图中细实线是为了分辨曲线弯折程度
添加的

应用广义 Suzuki 公式展开, 直接计算 $\frac{1}{N} \sum_{i,j,\mu} \langle S_i S_j S_\mu \rangle$, 可得

$$\frac{A_2}{A_1} = \frac{\Delta_2}{2\Delta_1^2} \left[\frac{20y - 12y^2 - y^3}{4(1-y)} + \left(\frac{y^4}{4} - 4 \right) g(y) \right], \quad (21)$$

其中 $y = \beta \Delta_1 \bar{J}$. 在 T_c 到 $8(T_c - T^*) + T_c$ 的温度区内(此温度范围与实验相对应)得到

$$\bar{\Delta} = 1.40. \quad (22)$$

MBBA 的实验结果^[10]为

$$\bar{\Delta} = 1.26 \pm 0.10. \quad (23)$$

文献[8]中算得的结果为 $\bar{\Delta} = 1.59$, 显然本文所得结果已与实验较为接近. 本文与文献[8]不同之处有三: (i) 所用哈密顿量形式不同, (ii) 推求 A_2 的方法不同, (iii) g 函数形式不同.

六、奇 偶 效 应

考虑长棒形液晶分子有宽度 D , 可以算得(5)式中的热平均量为

$$\langle \exp[-(x_{ij}^2 + y_{ij}^2)/r_0^2] \rangle \approx \frac{r_0^2 \pi}{L_x L_y} \exp(-D^2/r_0^2), \quad (24)$$

即 $\bar{J}$ 不仅与分子长度 d 有关, 而且与分子宽度 D 也有关(前几节的结果相应于取 $D = 0$).

根据液晶同系物分子结构随 n 系统变化的特点, 假设 D 与 d 有阶梯形关系, 可得到

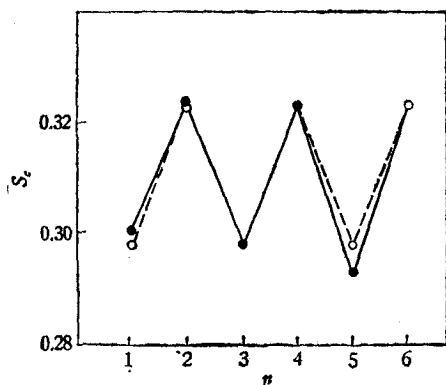


图4 $nO \cdot 4$ 的 S_c 曲线

与 d, D 同时有关的相图. 本工作中计算给出了液晶 nCB , $nOCB$ 和 $nO \cdot 4$ 的理论相图, 均得到有明显奇偶效应的结果, 且分别与相应的实验符合较好. 本工作中还计算了液晶 $nOCB$ 的过冷温度 T^* , 也得到明显的奇偶效应, 与相应的实验结果也符合较好.

对相变点序参数的奇偶效应也可由此出发得到. 我们计算了液晶 $nO \cdot 4$ 与液晶 AAB 的 S_c 曲线, 实点实线表示实验结果, 空心点与虚线表示理论结果(见图4).

其它有关物理量(如熵改变等)的奇偶效

应也可用上述方法计算出来.

在这以前, 关于奇偶效应的解释来自 Marcelja 对尾链形态做统计力学处理的理论^[11]. 本节根据分子长度 d 和宽度 D 的改变, 提出了关于奇偶效应的一个新的解释, 并首次计算了过冷温度 T^* 的奇偶效应. 我们并不完全排除尾链形态的统计作用, 本文只是试图说明: 单是这种分子长度和宽度的改变就足以解释各种奇偶效应.

七、讨 论

本文 $F(d)$ 的形式并不具有唯一性, 就象简单液体的 V_0 函数并不具有唯一性一样. 与 $W_{2l}(r_{ij})$ 一样, $F(d)$ 的具体形式只能通过实践来鉴定, 本工作就是朝这方面迈出的一步, 要最后确定 $F(d)$ 所有可能的合理形式, 还得进行许多工作. 然而正如本文所指出的: 当 $F(d)$ 由 (6) 式定义时, $T_{NI}(d)$ 只有三种类型, 这说明虽然增加了可调参数, 但相图类型却可能还是有限的.

本文计算相图用了平均场近似后, 还牵涉求解三个联立的自洽方程, 这已经够复杂的了. 事实上, 文献上还未有人超越平均场近似来计算过任何液晶相图, 包括比较简单的 $-N$ 相图在内. 文献[2, 4]虽然用了平均场计算, 却没有给出从 H 到 H_{MF} 的推导.

参 考 文 献

- [1] K. K. Kobayashi, *J. Phys. Soc. (Japan)*, **29**(1970), 101; *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **13**(1971), 137.
- [2] W. L. McMillan, *Phys. Rev. A*, **4**(1971), 1238; **6**(1972), 936.
- [3] C. Kittel, *Introduction of Solid State Physics*, John Wiley, New York, (1976).
- [4] F. T. Lee, H. T. Tan, Y. M. Shih, C-W. Woo, *Phys. Rev. Lett.*, **31**(1973), 1117.
- [5] Shu Changqing (舒昌清), Lin Lei (林磊), Wang Liangyu (王良御) *Commun. Theor. Phys. (Peking)*, **1**(1982), 107.
- [6] 张昭庆、冯克安、林磊, *物理学报*, **29** (1980), 807.
- [7] K. Muta, H. Takezoe, A. Fukuda, E. Kuze, *Japan. J. Appl. Phys.*, **18**(1979), 2073.
- [8] Lin Lei (林磊), *Phys. Rev. Lett.*, **43**(1979), 1604.
- [9] Lin Lei (林磊), *J. Physique (Paris)*, **43**(1982), 251.
- [10] P. H. Keyes, J. R. Shane, *Phys. Rev. Lett.*, **42**(1979), 722.
- [11] S. Marcelja, *J. Chem. Phys.*, **60**(1974), 3599.

MOLECULAR THEORY OF LIQUID CRYSTALS

SHU CHANG-QING LIN LEI

(Institute of Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

Starting from a modified Kobayashi-McMillan hamiltonian, (1) phase diagrams of liquid crystals of long molecules are calculated in the mean field approximation; (2) orientation correlation functions are calculated; (3) magnetic birefringence experimental results (of Muta et al.) on homologous series are analysed and explained qualitatively for the first time; (4) apparent exponent $\bar{\Delta}$ is calculated and $\Delta=1.40$ is obtained; (5) a new explanation of the even-odd effect of liquid crystals differing from that of Marcelja is proposed. The even-odd effect of supercooling temperature T^* is calculated for the first time.

七种离子注入砷化镓的 射程统计参数计算

程兆年 朱文玉 王渭源

(中国科学院上海冶金研究所)

1981 年 8 月 11 日收到

提 要

采用逐级校正法数值求解 LSS 方程, 计算了 Be^+ , N^+ , Ne^+ , Mg^+ , Si^+ , Ar^+ , Cr^+ 共七种离子注入到砷化镓靶中的射程统计参数 R_p , ΔR_p , R_1 . 提出了计算 R_p , ΔR_p , R_1 时简单的初值计算公式, 既可避免能量零点发散, 并有足够的计算精度. 所提出的 β 积分表式, 可大大节省机器计算时间. 所使用的数值方法和计算程序也适用于其它离子注入到其它靶材料的计算.

一、引 言

离子注入技术是半导体工艺中一种重要的掺杂手段, 它具有掺杂浅、可控性和重复性好等优点. 在硅器件中已成功地获得广泛应用, 现正扩大应用到砷化镓等 III-V 族化合物.

1961 年, Lindhard 和 Scharff^[1] 提出了注入离子在靶材料中空间分布的输运方程, 首次计算了入射能量为 keV 数量级的离子注入射程统计参数. 1963 年, Lindhard, Scharff 和 Schiøtt^[2] 又计算了重离子分布的统计参量, 并形成了 LSS 理论. 1968 年, Sanders^[3] 发展了 LSS 理论, 导出了普适的射程统计参量表式, 并对一种特殊情形给出了解析解. 以后, 不少作者^[4-11] 从事过这方面的工作, 并将之应用于半导体材料. 其中, 1975 年, Gibbons, Johnson 和 Mylroie^[9] 对半导体硅及有关材料作了系统计算, 出版了内容丰富的数据表. 在砷化镓方面, 他们计算了 C^+ , O^+ , Si^+ , S^+ , Zn^+ , Ge^+ , Se^+ , Cd^+ , Sn^+ , Te^+ , Hg^+ 共十一种离子, 但一些近来在实际工作中常遇到的轻元素和惰性元素的射程参数未作计算. 有鉴于此, 很有必要进行补充计算, 以供实际工作参考.

近两年来, 我们在砷化镓中离子注入射程参数方面开展了一些实验工作^[12,13], 也对此进行了近似计算^[14]. 为了补充 Gibbons 的计算结果, 本文中我们用逐级校正法数值求解 LSS 方程, 以得到有关离子的精确计算值. 所计算的有 Be^+ , N^+ , Ne^+ , Mg^+ , Si^+ , Ar^+ , Cr^+ 共七种离子, 其中计算 Si^+ 的目的是与 Gibbons 等的结果进行比较, 而其他离子则是 Gibbons 等未计算而目前实际工作中比较感兴趣的. 文中, 详细介绍了所使用的数值计算方法和计算程序, 可供其它离子-靶体系计算参考.

二、基本方程

入射离子进入无定形靶材料后,与靶内原子核及电子相碰撞,损失其能量,最后停于某处.以球坐标描述离子分布,取入射点为原点,以 $p(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E)$ 表示从原点入射,具有动能 E 、运动方向 $\mathbf{n}$ 的离子经过若干次碰撞最后停止于空间 $\mathbf{r}$ (矢量坐标) 处的几率密度.

Lindhard, Sharff 和 Schiøtt 给出 $p(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E)$ 所满足的输运方程为^[1,2,3]

$$\begin{aligned} & \frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \nabla p(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E) \\ &= N \int_{T=0}^{rE} d\sigma(E, T) \left\{ \int_{Q'} \frac{dQ'}{2\pi} \delta[\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}' - \cos\theta(E, T)] p(\mathbf{r}, \mathbf{n}', E - T) \right. \\ & \quad \left. - p(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E) \right\}, \end{aligned} \quad (1)$$

式中 $p(\mathbf{r}, \mathbf{n}', E - T)$ 是在入射点附近经过一次碰撞(以散射角 θ 散射到 dQ' 内)的离子(其运动方向已变为 $\mathbf{n}'$, 满足 $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}' = \cos\theta$; 其能量已变为 $E - T$, T 是离子传输给靶原子的能量)再经过若干次碰撞以后停止于 $\mathbf{r}$ 处的几率密度. 对 Q' 积分中的变元 θ 和 T 并不独立,故需引入 δ 函数加以限定. $d\sigma(E, T)$ 是微分碰撞截面. rE 为 T 的最大值,系对头碰撞时的传输能量, $r = 4M_1M_2/(M_1 + M_2)^2$. M_1 为离子质量, M_2 为靶原子质量. N 为单位体积靶原子数.

考虑入射粒子为一个线束, $p(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E)$ 应具有轴对称性,以入射轴(其方向为 $\mathbf{n}$) 为对称轴. 记 $r = |\mathbf{r}|$, $\eta = \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{n}}{r}$, 方程(1)可简化为

$$\begin{aligned} & \eta \frac{\partial p(r, \eta, E)}{\partial r} + \frac{1 - \eta^2}{r} \frac{\partial p(r, \eta, E)}{\partial \eta} \\ &= N \int_{T=0}^{rE} d\sigma(E, T) \left\{ \int_{Q'} \frac{dQ'}{2\pi} \delta[\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}' - \cos\theta(E, T)] p(r, \eta', E - T) \right. \\ & \quad \left. - p(r, \eta, E) \right\}. \end{aligned} \quad (2)$$

输运方程(1)和(2)均被称为 LSS 积分微分方程. 利用输运方程直接计算离子分布甚为困难,但可从输运方程得到离子分布的统计参数.

Sanders^[3] 按余弦 η 的勒让德多项式 $P_l(\eta)$ 展开 $p(r, \eta, E)$, 以分离 η :

$$p(r, \eta, E) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) m_l(r, E) P_l(\eta). \quad (3)$$

(3)式代入(2)式,经整理,并由勒让德多项式的正交完备性,使方程两边同 l 阶 $P_l(\eta)$ 项系数相等,方程(2)可转化为关于 $m_l(r, E)$ 的递推方程系列:

$$\begin{aligned} & (l+1) \frac{\partial m_{l+1}(r, E)}{\partial r} + l \frac{\partial m_{l-1}(r, E)}{\partial r} \\ & + (l+1)(l+2) \frac{m_{l+1}(r, E)}{r} - l(l-1) \frac{m_{l-1}(r, E)}{r} \end{aligned}$$

$$= (2l+1)N \int_{T=0}^{rE} d\sigma(E, T) \{m_l(r, E-T)P_l[\cos\theta(E, T)] - m_l(r, E)\}. \quad (4)$$

再通过引入 $m_l(r, E)$ 对 r 的各阶矩以消去 r , 矩函数定义为

$$m_{n,l}(E) = 4\pi \int_0^\infty m_l(r, E) r^{n+2} dr. \quad (5)$$

再经整理, 方程(4)又进一步转化为

$$\begin{aligned} & (l+1)(l-n)m_{n-1,l+1}(E) - l(l+n+1)m_{n-1,l-1}(E) \\ & = (2l+1)N \int_{T=0}^{rE} d\sigma(E, T) \{m_{n,l}(E-T)P_l[\cos\theta(E, T)] - m_{n,l}(E)\}. \end{aligned} \quad (6)$$

此式为仅含未知函数 $m_{n,l}(E)$ 的积分方程, 在满足条件 $(l+n)$ 为偶数及 $l \leq n$ 时有非零解. 在递推求解时, 等式左边为已知函数. 首先有全空间的几率积分等于 1, 即

$$m_{0,0}(E) = \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} p(r, \eta, E) r^2 d\eta d\phi = 1. \quad (7)$$

Sanders^[3] 给出了通过 $m_{n,l}(E)$ 表示的离子分布各阶统计参量, 其中

$$R_p(E) = m_{1,1}(E), \quad (8)$$

$$\Delta R_p(E) = \sqrt{\frac{1}{3} [m_{2,0}(E) + 2m_{2,2}(E)] - [m_{1,1}(E)]^2}, \quad (9)$$

$$R_\perp(E) = \sqrt{\frac{2}{3} [m_{2,0}(E) - m_{2,2}(E)]}. \quad (10)$$

为便于对(6)式求解, 将它写成

$$g_{n,l}(E) = -N \int_{T=0}^{rE} d\sigma(E, T) \{m_{n,l}(E-T)P_l[\cos\theta(E, T)] - m_{n,l}(E)\}. \quad (11)$$

显见有 $g_{1,1}(E) = m_{0,0}(E) = 1$; $g_{2,0}(E) = 2m_{1,1}(E)$; $g_{2,2}(E) = 2m_{1,1}(E)$.

积分方程(11)的数值求解亦甚困难. 仿 Brice^[7], 把 $m_{n,l}(E-T)$ 作泰勒展开

$$m_{n,l}(E-T) = m_{n,l}(E) - \frac{dm_{n,l}(E)}{dE} T + \frac{d^2 m_{n,l}(E)}{2! dE^2} T^2 - \dots, \quad (12)$$

代入(11)式, 于是未知函数可从积分号内移出, 使积分号内仅留已知函数, 从而化成高阶微分方程. 可表示为

$$g_{n,l}(E) = \beta_{n10}(E)m_{n,l}(E) + \beta_{n11}(E) \frac{dm_{n,l}(E)}{dE} - \beta_{n12}(E) \frac{d^2 m_{n,l}(E)}{2! dE^2} + \dots, \quad (13)$$

式中

$$\beta_{n10}(E) = N \int_{T=0}^{rE} \{1 - P_l[\cos\theta(E, T)]\} d\sigma(E, T) \quad (14)$$

$$\beta_{n1j}(E) = N \int_{T=0}^{rE} T^j P_l[\cos\theta(E, T)] d\sigma(E, T) \quad j = 1, 2, 3, \dots. \quad (15)$$

记 $\mu = \frac{M_2}{M_1}$, 散射角 $\cos\theta(E, T)$ 按粒子碰撞理论给出为

$$\cos\theta(E, T) = \sqrt{1 - \frac{T}{E}} + \frac{1-\mu}{2} \frac{\frac{T}{E}}{\sqrt{1 - \frac{T}{E}}} = Z\left(\frac{T}{E}\right). \quad (16)$$

而微分碰撞截面为离子与靶原子核碰撞的 $d\sigma_n$ 及离子与电子碰撞的 $d\sigma_e$ 之和. 离子注入于 GaAs, $d\sigma_n$ 和 $d\sigma_e$ 又均为 Ga 及 As 的贡献之和. 在离子与电子碰撞时, 因电子甚轻, $\cos\theta \approx 1$, 且有 $T \ll E$, 故 T 的高次项可以忽略. 注意到电子阻止本领

$$S_e(E) = \int_{T=0}^{T^E} T d\sigma_e(E, T),$$

我们将 β 积分整理为

$$\begin{aligned} \beta_{n10}(E) = N & \left[\int_{T=0}^{T_{Ga}^E} \left\{ 1 - P_l \left[Z_{Ga} \left(\frac{T}{E} \right) \right] \right\} d\sigma_{n,Ga}(E, T) \right. \\ & \left. + \int_{T=0}^{T_{As}^E} \left\{ 1 - P_l \left[Z_{As} \left(\frac{T}{E} \right) \right] \right\} d\sigma_{n,As}(E, T) \right], \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \beta_{n11}(E) = N & \left\{ \int_{T=0}^{T_{Ga}^E} TP_l \left[Z_{Ga} \left(\frac{T}{E} \right) \right] d\sigma_{n,Ga}(E, T) + S_{e,Ga}(E) \right. \\ & \left. + \int_{T=0}^{T_{As}^E} TP_l \left[Z_{As} \left(\frac{T}{E} \right) \right] d\sigma_{n,As}(E, T) + S_{e,As}(E, T) \right\}, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \beta_{n1j}(E) = N & \left\{ \int_{T=0}^{T_{Ga}^E} T^j P_l \left[Z_{Ga} \left(\frac{T}{E} \right) \right] d\sigma_{n,Ga}(E, T) \right. \\ & \left. + \int_{T=0}^{T_{As}^E} T^j P_l \left[Z_{As} \left(\frac{T}{E} \right) \right] d\sigma_{n,As}(E, T) \right\}, \quad j = 2, 3, \dots. \end{aligned} \quad (19)$$

为使有关参量无量纲化, 引入 C_p , C_e 如下:

$$C_p = \frac{4\pi a^2 N M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2}, \quad (20)$$

$$C_e = \frac{4\pi e_0 a M_2}{Z_1 Z_2 q^2 (M_1 + M_2)}, \quad (21)$$

式中 $a = 0.8853 a_0 Z^{-\frac{1}{2}}$, 为 Thomas-Fermi 屏蔽半径, $Z = (Z_1^{1/3} + Z_2^{1/3})^{3/2}$, a_0 为玻尔半径, q 为电子电荷, e_0 为真空介电常数. 并记 $\xi = \sqrt{\frac{T}{rE}}$, $\epsilon = C_e E$, 取离子与靶相互作用势为 Thomas-Fermi 势^[6,15],

$$d\sigma_n(E, T) = \frac{C_p}{NC_e} \frac{1}{T} f(\epsilon\xi) d\xi, \quad (22)$$

$f(\epsilon, \xi)$ 为 Thomas-Fermi 势数值结果的逼近式,

$$f(\epsilon\xi) = \frac{1.309(\epsilon\xi)^{1/6}}{[1 + 1.900(\epsilon\xi)^{4/9}]^{3/2}}. \quad (23)$$

按 Lindhard 和 Winther^[16], $S_e(E)$ 可表示为

$$S_e(E) = 0.0793 \frac{C_p Z_1^{\frac{1}{2}}}{NC_e^{\frac{1}{2}}} \sqrt{\frac{Z_1 Z_2 (M_1 + M_2)^3}{Z M_1^3 M_2}} E^{\frac{1}{2}}. \quad (24)$$

三、计算方法

1. 逐级校正法

求解高阶微分方程(13)的数值方法很多, 我们采用 Gibbons^[9] 的逐级校正法.

将 $m_{n,i}(E)$ 表示为一个零级近似项 $m_{n,0}(E)$ 及各级校正项 $m_{n,i}(E)$ 之和:

$$m_{n,i}(E) = m_{n,0}(E) + m_{n,1}(E) + m_{n,2}(E) + \dots \quad (25)$$

将(25)式代入(13)式,先略去二阶微商和一级校正以上各项,得零级近似项所满足的一阶微分方程

$$\beta_{n,1}(E) \frac{dm_{n,0}(E)}{dE} + \beta_{n,0}(E)m_{n,0}(E) = g_{n,i}(E). \quad (26)$$

(26)式代入(13)式,于是可在(13)式等号两边相消,再略去三阶微商、一级校正的二阶微商和二级校正以上各项,得一级校正项所满足的一阶微分方程

$$\beta_{n,1}(E) \frac{dm_{n,1}(E)}{dE} + \beta_{n,0}(E)m_{n,1}(E) = \beta_{n,2}(E) \frac{d^2m_{n,0}(E)}{2!dE^2}. \quad (27)$$

在(26)式 $m_{n,0}(E)$ 解得以后, (27) 式右边为已知函数. 如法可得二级校正项所满足的一阶微分方程

$$\begin{aligned} & \beta_{n,1}(E) \frac{dm_{n,2}(E)}{dE} + \beta_{n,0}(E)m_{n,2}(E) \\ &= \beta_{n,2}(E) \frac{d^2m_{n,1}(E)}{2!dE^2} - \beta_{n,3}(E) \frac{d^3m_{n,0}(E)}{3!dE^3}. \end{aligned} \quad (28)$$

将(13)式取到三阶微商,则校正项可算到二级校正. (13)式右边略去的项为

$$\phi(E) = -\beta_{n,2}(E) \frac{d^2m_{n,2}(E)}{2!dE^2} + \beta_{n,3}(E) \frac{d^3m_{n,1}(E)}{3!dE^3} + \beta_{n,3}(E) \frac{d^3m_{n,2}(E)}{3!dE^3}. \quad (29)$$

由于校正和表式(25)的任意性,故此方法仅在未知函数单调且缓慢变化时才有 $\phi(E) \approx 0$, 使数值求解可行. 如此将高阶微分方程转换成递推的一阶微分方程系列,比起其他数值求解方法来,可简化计算程序. 关于这一计算方法的精度将在下节讨论.

2. 初值处理

显然在 $E = 0$ 时,有 $R_p = 0$, $\Delta R_p = 0$, $R_\perp = 0$. 由(8)–(10)式知,此时 $m_{1,1} = 0$, $m_{2,0} = 0$, $m_{2,2} = 0$. 但不能用作求解方程(26)–(28)的初值. 因为 $E = 0$ 时 $\cos\theta(E, T)$ 表示式(16)出现能量零点发散(此时 $\cos\theta$ 无实际的物理意义),故无法计算 $E = 0$ 时的 β 函数. 经代数变换后可得在 $E = 0$ 时除 $\beta_{1,0}$ 和 $\beta_{2,0}$ 外其余 $\beta_{n,i}$ 均为零,但 $\beta_{1,0}$ 和 $\beta_{2,0}$ 表式中分母为 E (下节(37)式),使计算无法进行.

为避免能量零点发散,必须取一极小的 E_0 值作为初始点,并设法计算该 E_0 值下的各 $m_{n,i}$. 在低能量时,由于:(1)电子阻止可以忽略;(2)由 Thomas-Fermi 位势计算的核阻止截面接近于 $s = 3$ 幂指数位势情形^[6],并且在幂指数位势下积分方程(11)属第一类 Volterra 方程,可以有解析解^[3,6]

$$m_{n,i}(E) = \Lambda_{n,i} E^{2n/s}. \quad (30)$$

由此可计算 E_0 处的初值. 但 $\Lambda_{n,i}$ 的计算甚为麻烦,除表式甚长(文献[3],(2.42)式)外,还包括若干个复杂的定积分. 故虽为解析解,仍需通过计算机数值积分求解^[3].

我们注意到在低能下有(30)式成立这一物理事实,对所有 i 值下的 $m_{n,i}$ 均取如下表示式:

$$m_{n,i}(E) = \Lambda_{n,i} E^{2n/3}. \quad (31)$$

由此可得到 $m_{nlj}(E)$ 的各阶微商, 一起代入方程(26)–(28), 得到

$$A_{n10} = \frac{G_{n1}(E_0)}{D_{n1}E_0^{(2n-2)/3}}, \quad (32)$$

$$A_{n11} = \frac{n(2n-3)}{9} \frac{B_{n12}A_{n10}}{D_{n1}}, \quad (33)$$

$$A_{n13} = \frac{n(2n-3)}{9} \frac{B_{n12}A_{n11}}{D_{n1}} - \frac{n(2n-3)(2n-6)}{81} \frac{B_{n13}A_{n10}}{D_{n1}}, \quad (34)$$

式中

$$D_{n1} = B_{n10} + \frac{2n}{3} B_{n11}, \quad (35)$$

$$B_{n1j} = \beta_{n1j}(E_0) \cdot E_0^{2/3-j}. \quad (36)$$

求解上述各式可利用求解微分方程过程中已编制的计算 β 函数程序, 计算甚为简便. 并且, 这样算得的初值及其微商可很好地与对应于泰勒展开截断的逐级校正相匹配.

3. β 函数的计算

函数 $\beta_{n1j}(E)$ 是微分散射截面 $d\sigma(E, T)$ 的含权积分. 利用勒让德多项式 $P_l(x)$ 表示式, 并将(22)–(24)式代入(17)–(19)式, 我们将 β 函数作积分变元变换整理为

$$\beta_{n10}(E) = \sum_{Ga, As} \left\{ \frac{NC_p}{C_e E} \int_0^1 Q_{n10}(\xi) f(e\xi) d\xi \right\}, \quad (37)$$

$$\beta_{n11}(E) = \sum_{Ga, As} \left\{ \frac{NC_p}{C_e} \int_0^1 Q_{n11}(\xi) f(e\xi) d\xi + S_e(E) \right\}, \quad (38)$$

$$\beta_{n1j}(E) = \sum_{Ga, As} \left\{ \frac{NC_p}{C_e} E^{j-1} \int_0^1 Q_{n1j}(\xi) f(e\xi) d\xi \right\} \quad (j = 2, 3, \dots); \quad (39)$$

其中 $Q_{n1j}(\xi)$ 分别表示如下:

$$Q_{110}(\xi) = \frac{1 - Z(\xi)}{r\xi^2}, \quad (40)$$

$$Q_{11j}(\xi) = (r\xi^2)^{j-1} Z(\xi) \quad (j = 1, 2, \dots), \quad (41)$$

$$Q_{200}(\xi) = 0, \quad (42)$$

$$Q_{20j}(\xi) = (r\xi^2)^{j-1} \quad (j = 1, 2, \dots), \quad (43)$$

$$Q_{200}(\xi) = \frac{3}{2} \frac{1 - Z^2(\xi)}{r\xi^2}, \quad (44)$$

$$Q_{22j}(\xi) = \frac{1}{2} (r\xi^2)^{j-1} [3Z^2(\xi) - 1] \quad (j = 1, 2, \dots), \quad (45)$$

式中

$$Z(\xi) = Z\left(\frac{T}{E}\right) = \sqrt{1 - r\xi^2} + \frac{1 - \mu}{2} \frac{r\xi}{\sqrt{1 - r\xi^2}}. \quad (46)$$

这一组 β 函数表式, 比 Gibbons 给出的 β 表式为好. Gibbons 为了避免被积函数在 $\xi = 0$ 处分母为 0, 给出了一个很复杂的 β 表式(文献[9], (3.4)式). 我们将 $Z(\xi)$ 表式代入(40), (44)式, 作代数变换后得

$$\xi = 0 \text{ 时, } Q_{110}(\xi) = \frac{\mu}{2}, \quad Q_{220}(\xi) = \frac{3}{2} \mu. \quad (47)$$

(40), (44)式配以(46)式,便可完全计算在积分区间 $[0, 1]$ 上的 $Q(\xi)$.

在数值求解微分方程时,对于 $E = 0-1000\text{keV}$ 内每一步长的整点和半点上都需要计算 $\beta_{nli}(E)$,这一计算约占全部计算时间的80%,我们所用的这一 β 函数表式可大大节省机器时间.因为 $Q_{nli}(\xi)$ 函数只含 ξ 不含 e ,与能量独立,故采用定步长辛卜生公式进行数值积分时,可在 ξ 取值 $[0, 1]$ 区间内等分的 2^k 个节点上(我们计算时取 $k=7$)预先算好存储.计算每一能量下的 β 函数时,在 $[0, 1]$ 区间上 2^k 个 ξ 处,只需计算 $f(e\xi)$,再乘以存储的 $Q(\xi)$,从而完成 2^k 个被积函数的计算.这样,数值积分的机器时间大为缩短.

此外,由于递推求解微分方程过程中要用差分方法得到各阶微商,能量步长不能取得太小.又由于除 $E \rightarrow 0$ 外, β 函数变化平缓,无奇点.故为了提高运算速度,我们在计算中逐级交替地使用数值积分和 Everett 插值公式(例如,参考[17])来计算 β 函数.因为这是一个纯粹的数值方法问题,不涉及物理意义,不多赘述.

4. 微分方程的数值解

所有的微分方程采用显式四阶 Rung-Kutta 公式求解.初始点取 $E_0 = 0.0625\text{keV}$.至能量 1000keV 共变步长6次,分别在 $E = 1.25; 4.25; 14; 201; 500\text{keV}$ 处放大步长一倍.开始时取 $\Delta E = 0.0625\text{keV}$,在 $E > 500\text{keV}$ 后 $\Delta E = 2\text{keV}$,以保证使我们需要的第一点的输出数据的能量正好落在 10keV 上,且在 10keV 的整数倍处均有计算结果输出.

每一步求解微分方程前需先计算整点和半点处的所有 $\beta_{nli}(E)$ 函数值;计算高阶矩函数时仅解有低阶矩函数的整点值,其半点值由牛顿插值公式计算;在所有半点和整点处,一阶微商值在 Rung-Kutta 步骤中同时给出并存储,高阶微商值采用中心差分公式计算.

求解各 $m_{nli}(E)$ 的起始点逐级逐级步进.计算 $m_{110}(E)$ 时初始点取为 E_0 ,计算 $m_{111}(E)$ 时初始点取为 $(E_0 + \Delta E)$.因为计算 $m_{111}(E)$ 时需用到 $\frac{d^2 m_{110}(E)}{dE^2}$,但由计算得到的 $m_{110}(E)$ 只能给出 $(E_0 + \Delta E)$ 处的 $\frac{d^2 m_{110}(E)}{dE^2}$ 值,给不出 E_0 处的 $\frac{d^2 m_{110}(E)}{dE^2}$ 值.同理,计算 $m_{112}(E)$ 时初始点取 $(E_0 + 2\Delta E)$,算得 $m_{112}(E)$ 后按(25)式相加给出 $(E_0 + 2\Delta E)$ 处的 $m_{11}(E)$ 值.这样,计算二阶矩函数的零级近似项时,因求解方程(26)时要求已知 $m_{11}(E)$,初始点就只能落在 $(E_0 + 2\Delta E)$ 处.计算其各级校正项,初始点再继续步进.采用这种初态方式,可以保证各阶差商的连贯性,从而保证了求解微分方程的稳定性.显然,起步时 ΔE 应该取得较小.

四、结果和讨论

我们计算了七种离子注入于 GaAs 的 $R_p(E)$, $\Delta R_p(E)$, $R_\perp(E)$.能量范围自 $0-1000\text{keV}$.显然,上面所讨论的数值方法是普适的,对于其他离子注入到其他靶材料也同样适用.正因为如此,我们在编制计算程序时也考虑到使之具有普适性.计算程序送入计算机以后,只需输入入射离子的原子序数、原子量以及靶材料的密度、原子序数、原子

量, 计算机经过一段时间(我们所使用的 DJS-130 机较小, 约需十余小时)运算, 便可输出结果并打印制表。因此, 所使用的计算程序也适用于其他离子注入到其他靶材料的计算。

Be^+ , N^+ , Ne^+ , Mg^+ , Si^+ , Ar^+ , Cr^+ 注入于 GaAs 的计算结果简要地列于表 1。

表 1 Be^+ , N^+ , Ne^+ , Mg^+ , Si^+ , Ar^+ , Cr^+ $\rightarrow$ GaAs 的 R_p , ΔR_p , R_L

GaAs	能 量 (keV)	Be^+	N^+	Ne^+	Mg^+	Si^+	Ar^+	Cr^+
R_p (μm)	10	0.0294	0.0174	0.0131	0.0115	0.0103	0.0088	0.0075
	20	0.0600	0.0337	0.0242	0.0207	0.0182	0.0152	0.0126
	50	0.1577	0.0859	0.0593	0.0494	0.0424	0.0336	0.0266
	100	0.3184	0.1765	0.1213	0.1000	0.0850	0.0654	0.0497
	150	0.4685	0.2657	0.1845	0.1523	0.1291	0.0987	0.0736
	200	0.6079	0.3517	0.2472	0.2049	0.1739	0.1328	0.0981
	300	0.8611	0.5136	0.3689	0.3085	0.2632	0.2025	0.1485
	400	1.0876	0.6632	0.4847	0.4087	0.3507	0.2726	0.2001
	500	1.2943	0.8024	0.5946	0.5050	0.4357	0.3422	0.2522
	600	1.4854	0.9331	0.6993	0.5975	0.5181	0.4109	0.3044
	800	1.8319	1.1735	0.8950	0.7723	0.6750	0.5446	0.4079
	1000	2.1428	1.3921	1.0757	0.9351	0.8225	0.6731	0.5095
ΔR_p (μm)	10	0.0257	0.0147	0.0103	0.0086	0.0074	0.0058	0.0046
	20	0.0442	0.0251	0.0173	0.0143	0.0126	0.0095	0.0075
	50	0.0868	0.0512	0.0355	0.0294	0.0251	0.0191	0.0148
	100	0.1341	0.0846	0.0609	0.0508	0.0436	0.0334	0.0256
	150	0.1661	0.1101	0.0818	0.0693	0.0599	0.0465	0.0356
	200	0.1897	0.1304	0.0996	0.0854	0.0744	0.0586	0.0451
	300	0.2230	0.1612	0.1283	0.1122	0.0991	0.0803	0.0628
	400	0.2458	0.1837	0.1506	0.1338	0.1198	0.0994	0.0788
	500	0.2627	0.2012	0.1687	0.1517	0.1371	0.1162	0.0935
	600	0.2759	0.2153	0.1837	0.1669	0.1521	0.1312	0.1070
	800	0.2955	0.2369	0.2074	0.1913	0.1766	0.1568	0.1310
	1000	0.3096	0.2529	0.2255	0.2103	0.1961	0.1780	0.1516
R_L (μm)	10	0.0365	0.0205	0.0140	0.0115	0.0098	0.0074	0.0056
	20	0.0643	0.0355	0.0239	0.0196	0.0169	0.0122	0.0092
	50	0.1331	0.0754	0.0508	0.0412	0.0346	0.0250	0.0182
	100	0.2175	0.1306	0.0904	0.0738	0.0619	0.0445	0.0317
	150	0.2799	0.1756	0.1252	0.1033	0.0871	0.0630	0.0445
	200	0.3290	0.2135	0.1561	0.1301	0.1105	0.0808	0.0570
	300	0.4028	0.2744	0.2085	0.1771	0.1523	0.1141	0.0810
	400	0.4571	0.3220	0.2517	0.2171	0.1888	0.1446	0.1038
	500	0.4995	0.3608	0.2884	0.2516	0.2209	0.1726	0.1255
	600	0.5339	0.3934	0.3200	0.2820	0.2496	0.1984	0.1460
	800	0.5872	0.4455	0.3723	0.3332	0.2988	0.2444	0.1839
	1000	0.6272	0.4860	0.4143	0.3752	0.3398	0.2844	0.2181

计算中使用了我们整理给出的 β 函数表示式(37)–(39)。以下对表示式(37)–(39)再作一讨论。在(37)–(39)式中, 如果能将 $f(\sigma\xi)$ 写成

$$f(\sigma\xi) = f_1(\sigma) \cdot f_2(\xi), \quad (48)$$

则 $f_1(\epsilon)$ 可从 β 的积分号内移出

$$\int_0^1 Q_{nlj}(\xi) f(\epsilon \xi) d\xi = f_1(\epsilon) \int_0^1 Q_{nlj}(\xi) f_2(\xi) d\xi = f_1(\epsilon) \varphi_{nlj}, \quad (49)$$

φ_{nlj} 为一由定积分得出的常系数。这样, 高阶微分方程 (13) 便可不含积分函数。鉴于 $f(\epsilon \xi)$ 本身系由 Thomas-Fermi 势的数值结果逼近而来, 故将 $f(\epsilon \xi)$ 写成 (48) 式是有可能的。这可以成为一种近似计算的基础。

Gibbons 等^[11]给出逐级校正法计算的精度是 $R_p < 1\%$; $R_L < 5\%$ 。表 2 给出了 $\text{Si}^+ \rightarrow \text{GaAs}$ 情形下, 我们和 Gibbons 等^[11]计算结果的比较。可见, 我们结果在计算精度内与之相符。

表 2

能 量 (keV)	R_p		ΔR_p		R_L	
	本 文	文 献 [9]	本 文	文 献 [9]	本 文	文 献 [9]
10	0.0103	0.0103	0.0074	0.0074	0.0098	0.0097
50	0.0424	0.0424	0.0251	0.0254	0.0346	0.0343
100	0.0850	0.0850	0.0436	0.0442	0.0619	0.0615
500	0.4357	0.4357	0.1371	0.1384	0.2209	0.2201
1000	0.8225	0.8225	0.1961	0.1975	0.3398	0.3388

逐级校正法能将高阶微分方程化成递推的一阶微分方程系列, 但它并不一般地适合于求解高阶微分方程, 也并非对任意的高阶微分方程都能收敛。本文计算中, 矩函数 $m_{n,l}(E - T)$ 泰勒展开为 (12) 式是逐级校正法的基础。 T 是一次碰撞中的传输能量, 由于离子需经多次碰撞才停止于靶中某处, 故一般可认为 $T \ll E$ 。积分方程 (11) 经由 $m_{n,l}(E - T)$ 泰勒展开化成的高阶微分方程 (13) 式, 截断至 T^3 项 (三阶微商项) 亦为可行。也有的作者如 Furukawa 等^[8], 截断至 T^2 项, 而用通常求解二阶微分方程的数值方法求解矩函数 $m_{n,l}(E)$ 。

估计逐级校正法的截断误差 $\psi(E)$ 表式 (29), 比较麻烦。一种保守的估计方法是把二级校正项与零级近似项之比估计为计算精度。对于所计算的七种离子, 这样粗估的计算精度, 却也与 Gibbons 等给出的计算精度相合。

表 3

$E_0(\text{keV})$	10	5	1	0.5	0.1	0.05
A_{110}	2.32176×10^{-3}	2.12247×10^{-3}	1.95108×10^{-3}	1.93087×10^{-3}	1.92201×10^{-3}	1.92449×10^{-3}
A_{111}	-2.61259×10^{-6}	-2.03004×10^{-6}	-1.48049×10^{-6}	-1.40343×10^{-6}	-1.34590×10^{-6}	-1.34259×10^{-6}
A_{112}	1.21929×10^{-6}	1.25545×10^{-6}	1.30613×10^{-6}	1.32086×10^{-6}	1.34739×10^{-6}	1.35661×10^{-6}
A_{200}	1.31912×10^{-5}	1.12755×10^{-5}	9.82290×10^{-6}	9.70577×10^{-6}	9.77253×10^{-6}	9.85282×10^{-6}
A_{201}	5.28461×10^{-7}	4.86138×10^{-7}	4.61308×10^{-7}	4.64915×10^{-7}	4.82768×10^{-7}	4.91490×10^{-7}
A_{202}	7.87712×10^{-8}	7.45549×10^{-8}	7.31203×10^{-8}	7.42232×10^{-8}	7.78874×10^{-8}	7.95450×10^{-8}
A_{220}	5.70890×10^{-6}	4.84148×10^{-6}	4.15770×10^{-6}	4.08360×10^{-6}	4.05878×10^{-6}	4.07188×10^{-6}
A_{221}	-8.56467×10^{-9}	-8.12725×10^{-9}	-7.80983×10^{-9}	-7.82296×10^{-9}	-7.95704×10^{-9}	-8.02687×10^{-9}
A_{222}	-1.34015×10^{-9}	-1.21480×10^{-9}	-1.11818×10^{-9}	-1.11284×10^{-9}	-1.12526×10^{-9}	-1.13413×10^{-9}