

化合物和合金中离子投影射程 分布矩的计算 (II)

轻离子 ($Z_1 \leq 10$) 的射程分布矩

夏日源 杨 洪 谭春雨 孙秀芳 高守文

(山 东 大 学)

1983年8月6日收到

提 要

本文根据离子在固体材料中电子阻止截面的实验资料,给出了低能 Li^+ , Be^+ , B^+ , C^+ , N^+ , O^+ , F^+ , Ne^+ 等离子在固体中电子阻止截面 S_e 的经验公式。这些经验公式既能够很好地反映电子阻止本领的 Z_1 和 Z_2 振荡,又能正确地给出 S_e 随离子能量 E 的变化关系。用这种以实验为基础的 S_e 经验公式和符合于 WHB 势的核散射函数,计数了从 H^+ 到 Ne^+ 十种轻离子在非晶 Al_2O_3 , SiO_2 , 20/25/Nb 不锈钢, LiNbO_3 和 UO_2 等材料中的投影射程分布的一次至三次矩。将计算值与近几年的实验测量及其他人的计算结果进行了比较,在低能端,我们计算的平均投影射程 R_p 与实验符合得更好。

一、引 言

在文献[1]中我们给出了重离子射程分布矩的计算结果。在那里,利用了 LSS 的电子阻止本领公式。当入射离子的速度 $v_1 \leq Z_1^{2/3}v_0$ 时 ($v_0 = e^2/\hbar$), LSS 和 Firsov 给出的电子阻止截面 S_e 都正比于离子速度,而当离子速度一定时, S_e 随离子的原子序数 Z_1 和靶元素的原子序数 Z_2 单调上升,因此不能反映出 S_e 随 Z_1 和 Z_2 振荡的实验现象^[2-7]。由于我们要提供能量 1keV 至 1MeV 范围的轻离子射程分布参数,该能量范围的主要部分,电子阻止是离子能量损失的主要原因,所以是否能准确给出电子阻止截面公式,关系到计算结果的可靠性。况且,对于 H^+ , He^+ 和 Li^+ 等很轻的离子,我们所考虑的能量上限超过了速度 $v_1 \leq Z_1^{2/3}v_0$ 的低能区, LSS 和 Firsov 的 S_e 公式是不能使用的。因此我们根据电子阻止本领的实验资料和离子贯穿介质时的有效电荷的概念,首先给出电子阻止截面 S_e 的经验公式,并验证该公式的可靠性。然后利用我们的 S_e 公式和 Wilson 等提出的原子相互作用势 (WHB 势)^[8], 计算从 H^+ 至 Ne^+ 等十种离子在非晶 Al_2O_3 , SiO_2 , 20/25/Nb 不锈钢, LiNbO_3 和 UO_2 等材料中的投影射程分布参数。

在文献[1]中,已简要地说明了上述这些材料中的离子注入研究的实用价值。而这里涉及的十种轻离子,在采用离子束技术使材料表面层改性和器件制造方面,占有十分重要的地位。因此提供这些离子的射程分布参数,为使用离子束技术使材料表层改性和研制新型器件提供参考。

二、低能离子在固体中的电子阻止截面

当离子在固体中贯穿时,按照 Bohr 的电子剥离标准,只有当离子速度 $v_1 \geq Z_1 v_0$ (K 壳层电子的轨道速度)时,离子的所有电子才能被剥光. 对于速度 $v_1 \leq v_0 Z_1^{2/3}$ (束缚电子的平均速度)的离子,电子只部分地被剥离. 因此离子贯穿靶材料时的有效电荷态是一个复杂的问题. Lindhard-Scharff 和 Firsov 分别提出了低能离子阻止本领的理论^[9,10], Lindhard-Scharff 给出的电子阻止截面 S_e 为

$$S_e = \xi_e \frac{8\pi e^2 a_0 Z_1 Z_2}{Z} \frac{v_1}{v_0} \quad (1)$$

这里 $\xi_e \simeq Z_1^{1/6}$, $Z = (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}$, $a_0 \simeq 0.529 \times 10^{-8} \text{cm}$.

由 Firsov 模型给出的电子阻止截面公式为^[11]

$$S_e = \frac{1}{4} m v_1 \int_{b_0}^{\infty} 2\pi b db \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_S dS \cdot v_e \rho_e \quad (2)$$

这里 m 是电子的质量, b 是离子与靶原子的碰撞参数, b_0 是最小碰撞参数, v_e 和 ρ_e 分别是电子平均速度和密度, S 平面是位于两碰撞原子连线中点并垂直于该连线的假想平面. 由于他们在计算中都用了 Thomas-Fermi 统计模型,因此不能体现出实验上发现的 S_e 随 Z_1 和 Z_2 振荡的行为. 许多作者试图修正 LS 和 Firsov 的处理方法^[12-15],这些修正都是用更现实的 Hartree-Fock-Slater 势或波函数代替 T-F 势,从而得到与实验定性符合较好的电子阻止本领. 但这些唯象方法没有把固体中原子间的束缚作用考虑进去,尽管在某些情况下理论与实验符合较好,但总的说,与实验在定量比较上,不准确度可达 20%—25%^[12]. 作为射程分布矩的计算,不宜采用上述唯象理论给出的 S_e 值.

很有希望的工作是沿着离子在介质中贯穿受阻的有效电荷概念发展起来的理论和实验工作. 根据有效电荷的概念^[16,17],离子贯穿介质时的有效电荷为 Z_1^* ,而有效电荷分数 ζ 的定义为

$$\zeta = \frac{Z_1^*}{Z_1} = \left(\frac{S_{ei}}{S_{ep}} \right)^{1/2} \frac{Z_p^*}{Z_1} \quad (3)$$

其中 S_{ei} 为离子在某种介质中的电子阻止截面, S_{ep} 为相同速度的质子在同种介质中的电子阻止截面, Z_p^* 为质子的有效电荷,可表示为^[18]

$$Z_p^* = 1 - \exp \left\{ - \left[0.2 \left(\frac{E}{m_1} \right)^{1/2} + 0.0012 \left(\frac{E}{m_1} \right) + 1.443 \times 10^{-5} \left(\frac{E}{m_1} \right)^2 \right] \right\} \quad (4)$$

这里离子能量 E 的单位为 keV, m_1 是离子的原子量,那么由(3)式得到

$$\left(\frac{\zeta Z_1}{Z_p^*} \right)^2 = \frac{S_{ei}}{S_{ep}} \quad (5)$$

所以只要知道某离子与质子的有效电荷比以及速度为 v_1 的质子在某种介质中的阻止截面,则可用(5)式求得速度为 v_1 的离子在该介质中的阻止截面. 关键问题是求离子与质子的有效电荷比. Ziegler 用简化阻止函数的概念,认为 S_e 随 Z_1 和 Z_2 的变化可以分离为 Z_1 和 Z_2 两个函数之积^[19]:

$$S_e = P(Z_1^*, v_1) \cdot T(Z_2, v_1) \quad (6)$$

那么速度相同的离子和质子在同种材料中, 电子阻止截面比值与材料无关, 即有效电荷比 ($\zeta Z_1/Z_p^*$) 与材料无关. Mertens 等^[20]从实验上证实了这一结论. Brandt 的有效电荷理论^[16]表明, 有效电荷只与离子相对于材料中价电子气的速度以及材料的价电子密度有关, 而与 Z_2 无关. 所以速度相同的离子和质子在同种材料中, 它们的有效电荷比对材料只有很弱的依赖关系. 因此, 我们在提出有效电荷比公式时, 不考虑 Z_2 的影响. Ziegler 给出了 He^+ 和 Li^+ 与质子的有效电荷比公式^[18]

$$\zeta_{\text{He}}/Z_p^* = \gamma \left\{ 1 - \exp \left[- \left(0.7746 + 0.1429 \left(\ln \frac{E}{m_1} \right) + 0.01562 \left(\ln \frac{E}{m_1} \right)^2 - 0.00267 \left(\ln \frac{E}{m_1} \right)^3 + 1.325 \times 10^{-6} \left(\ln \frac{E}{m_1} \right)^8 \right) \right] \right\}, \quad (7)$$

$$\zeta_{\text{Li}}/Z_p^* = \gamma \left\{ 1 - \exp \left[- \left(0.7138 + 0.002797 \left(\frac{E}{m_1} \right) + 1.348 \times 10^{-6} \left(\frac{E}{m_1} \right)^2 \right) \right] \right\}, \quad (8)$$

$$\gamma = 1 + (0.007 + 0.00005 Z_2) \exp \left[-7.6 - \ln \left(\frac{E}{m_1} \right)^2 \right]. \quad (9)$$

比 Li^+ 重的离子, Ziegler 采用了如下的有效电荷比:

$$\zeta/Z_p^* = 1 - [\exp(-A)][1.034 - 0.1777 \exp(-0.08114 Z_1)], \quad (10)$$

$$A = B + 0.0378 \sin \left(\frac{\pi B}{2} \right); \quad B = 0.886 \left(\frac{E}{25 m_1} \right)^{1/2} / Z_1^{2/3}.$$

(7)–(10) 式中 E 的单位为 keV. Ziegler 的经验公式 (10) 只适用于 $\frac{E}{m_1} \geq 200 \text{keV/amu}$ 的离子. 而我们考虑的能量范围为 1keV 至 1MeV, 除了 H^+ 和 He^+ 外, 从 Li^+ 至 Ne^+ 离子, 能量 $\frac{E}{m_1}$ 都低于 200keV/amu, 所以我们需要建立自己的低能有效电荷比公式. 这种经验公式必须同时满足三个条件: (a) 符合 S_e 的 Z_1 振荡规律; (b) 符合 Z_2 振荡规律; (c) 符合实验测得的 S_e 随离子能量 E 的变化规律. 为此, 我们采用参数拟合法, 在能量范围 $0.1 \text{keV/amu} \leq \frac{E}{m_1} \leq 150 \text{keV/amu}$ 内, 给出如下有效电荷比公式:

$$\left(\frac{\zeta}{Z_p^*} \right) = \begin{cases} (\beta \cdot \eta)^{1/2} \cdot f_1 & \text{当 } \frac{E}{m_1} \leq E_0 \left(\frac{\text{keV}}{\text{amu}} \right), \\ (\beta \cdot \eta)^{1/2} \cdot f_2 & \text{当 } \frac{E}{m_1} > E_0 \left(\frac{\text{keV}}{\text{amu}} \right), \end{cases} \quad (11)$$

$$f_1 = \frac{1}{1 + 0.123(Z_1 - 3)} \left\{ 1 - \exp \left[- \left[1 + \frac{7 - m_1}{2 m_1^2} \left(\frac{E}{m_1} \right)^{3/m_1} \right] \cdot \left[0.7138 + 0.002797 \left(\frac{E}{m_1} \right) + 1.348 \times 10^{-6} \left(\frac{E}{m_1} \right)^2 \right] \right] \right\}, \quad (12)$$

$$f_2 = \{ 1 - [\exp(-A)][1.034 - 0.1777 \exp(-0.08114 Z_1)] \}. \quad (13)$$

这里

$$A = B + 0.0378 \sin \left(\frac{\pi B}{2} \right) \cdot \frac{100 Z_1}{0.2 E}, \quad B = 0.886 \left(\frac{E}{25 m_1} \right)^{1/2} / Z_1^{2/3},$$

$$\beta = \frac{1}{\left[\left(1 + \frac{m_1 a}{\sqrt{E}} \right) (1 + b Z_1) \right]^2} \left[1 + 0.02 \times \left(\frac{E}{m_1} \right)^{1/2} + (10 - Z_1) \times 7.5 \times 10^{-3} \left(\frac{E}{m_1} \right)^{1/4} \right], \quad (14)$$

$$\eta = \begin{cases} 1 + \alpha - 0.005 \left(\frac{E}{m_1} - 4.2019 \right) & \text{当 } \left| 0.005 \left(\frac{E}{m_1} - 4.2019 \right) \right| \leq |\alpha|, \\ 1 & \text{当 } \left| 0.005 \left(\frac{E}{m_1} - 4.2019 \right) \right| > |\alpha|. \end{cases} \quad (15)$$

这里 a, b, α 和 E_0 是只与离子品种有关的参数. 从 Li^+ 到 Ne^+ 离子, 它们的值列于表 1 中.

表 1 a, b, α, E_0 参数表

参数 \ 离子	Li^+	Be^+	B^+	C^+	N^+	O^+	F^+	Ne^+
a	0.0200	0.05960	0.03802	0.02358	0.01267	0.00673	0.00844	0.00246
b	0.0300	0.01326	0.02031	0.02394	0.02451	0.02355	0.02045	0.01993
α	0.080	0.113	0.290	0.350	0.390	0.260	0.140	-0.041
$E_0 \frac{\text{keV}}{\text{amu}}$	60	35	27	20	20	20	20	20

根据 (5) 式以及 (11)–(15) 式, 从 Li^+ 至 Ne^+ 各种离子在某种介质中的电子阻止截面都可以由相同速度的质子在該种介质中电子阻止截面 S_{ep} 求得

$$S_e = \begin{cases} \beta \cdot \eta \cdot f_1^2 Z_1^2 S_{ep} & \text{当 } E/m_1 \leq E_0, \\ \beta \cdot \eta \cdot f_2^2 Z_2^2 S_{ep} & \text{当 } E/m_1 > E_0. \end{cases} \quad (16)$$

而质子在各种材料中的电子阻止截面可由 Andersen 和 Ziegler 的数据表^[21]给出, 或者由 Ziegler 的 He^+ 离子的阻止截面资料^[19], 再由他的 He^+ 离子和质子的有效电荷比给出, 本文采用了后者. 为了较准确地从 He^+ 离子的总阻止截面中扣除核阻止截面, 采用了如下的核阻止截面公式^[18]:

$$S_n = W(8.462 Z_1 Z_2 m_1) / [(m_1 + m_2)(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}], \quad (17)$$

$$W = 0.5 \ln(1 + \epsilon) / (\epsilon + 0.1078 \epsilon^{0.37544}), \quad (18)$$

$$\epsilon = 32.53 m_2 E / [Z_1 Z_2 (m_1 + m_2)(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}]. \quad (19)$$

这里 E 的单位为 keV, m_2 为靶元素的原子量.

为检验我们的 S_e 公式的可靠性, 将 (16) 式计算的低能离子在固体中的电子阻止截面与实验进行比较. 图 1 表示离子速度 v_1 分别为 $0.91v_0$, $0.63v_0$ 和 $0.411v_0$ 时, Li^+ 至 Ne^+ 离子在碳中的 S_e 随 Z_1 的变化. 实线是 Lindhard-Scharff 的理论结果, 圆点是 Ormrod 等人^[2]的测量值, “+”是我们用 (16) 式的计算值. 图 2 给出 Land 等人的 800keV 的 N^+ 离子在各种材料中的 S_e 随 Z_2 振荡的理论和实验情况^[11], 由图 1 和图 2 可见, 我们的低能电子阻止截面公式 (16) 能正确地反映电子阻止截面 S_e 随 Z_1 和 Z_2 振荡的规律. 图 3 给出 Li^+ 离子在碳、镍、硒靶中的 S_e 随离子能量 E 的变化, 图 3 中实线是 (16) 式的计算结

果, 实验点是 Andersen 和 Mertens 等人的实验^[20,22], 虚线是由 Ziegler 的 Li^+ 和质子有效电荷比 (8) 式计算的结果. 可见 (16) 式的结果比 Ziegler 的与实验符合得更好. 与

大多数实验资料比较表明, 我们给出的 S_e 经验公式与实验资料的符合程度在 6—10% 之内. 因此本文所提供的投影射程 R_p 与实验的符合程度一般在 10% 左右.

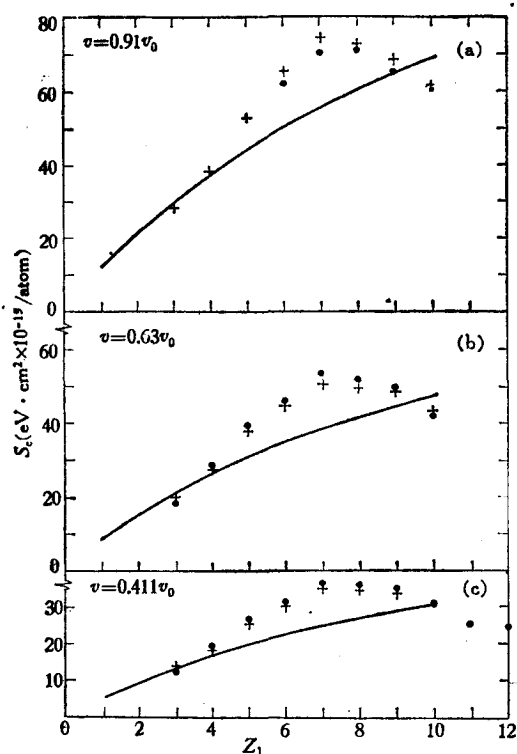


图 1 在三种不同的速度 v_i 下 Li^+ 至 Ne^+ 离子在碳中的电子阻止截面 S_e 随 Z_1 的振荡

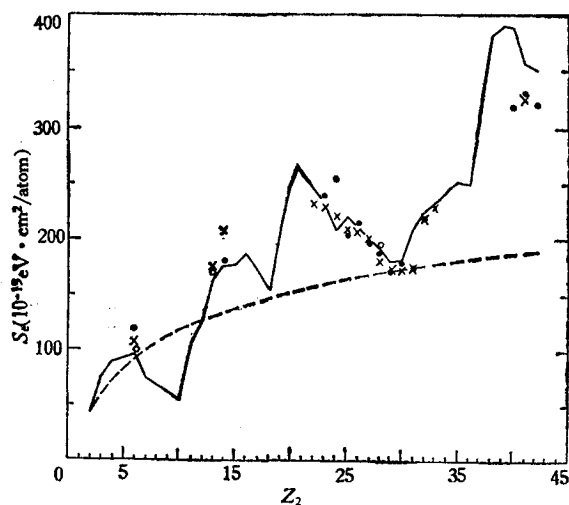


图 2 800keV 的 N^+ 离子在各种靶材料中的 S_e 随 Z_2 的振荡

—— 为 Land 等人的计算值; ● 为 Simons 等人的实验值; ○ 为 Porat 等人的实验值; × 为本文的计算值; ---- 为 Lindhard 的理论值

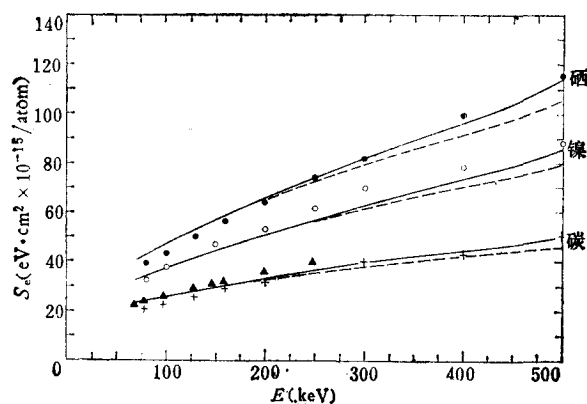


图 3

● 为硒^[22]; ○ 为镍^[22]; + 为碳^[22]; ▲ 为 Mertens 的实验

既然我们已建立比较可靠的低能离子在固体中电子阻止截面的经验公式,那么离子在贯穿固体材料时,单位路程上非弹性能量损失(称为电子的阻止本领)可表示为

$$NS_e = \begin{cases} Nf_1^2\beta\eta Z_1^2 S_{ep} \times 10^{-18} \left(\frac{\text{keV}}{\text{cm}} \right) & \text{当 } \frac{E}{m_1} \leq E_0, \\ Nf_2^2\beta\eta Z_1^2 S_{ep} \times 10^{-18} \left(\frac{\text{keV}}{\text{cm}} \right) & \text{当 } \frac{E}{m_1} > E_0. \end{cases} \quad (20)$$

这里 N 是靶材料的原子密度(以 cm^{-3} 为单位), S_e 和 S_{ep} 的单位用 $\text{cm}^2 \cdot \text{eV} \times 10^{-15}/\text{atom}$.

三、投影射程分布矩的计算及结果

在文献[1]中,我们详细地描述了离子投影射程分布矩的计算方法^[1],这里只把最必要的步骤简述如下:

微分方程组:

$$\begin{aligned} \frac{dM_{l,0}^n}{dE} &= \frac{g_l^n(E) - M_{l,0}^n B_{n,l,0}}{B_{n,l,1}^*}, \\ \frac{dM_{l,1}^n}{dE} &= \frac{\frac{1}{2!} \frac{d^2 M_{l,0}^n}{dE^2} B_{n,l,2} - M_{l,1}^n B_{n,l,0}}{B_{n,l,1}^*}, \\ \frac{dM_{l,2}^n}{dE} &= \frac{\frac{1}{2!} \frac{d^2 M_{l,1}^n}{dE^2} B_{n,l,2} - \frac{1}{3!} \frac{d^3 M_{l,0}^n}{dE^3} B_{n,l,3} - B_{n,l,0} M_{l,2}^n}{B_{n,l,1}^*}. \end{aligned} \quad (21)$$

这里 $l \leq n$, $n+l = \text{偶数}$, $n = 1, 2, 3$; $l = 0, 1, 2, 3$, 式中各量的意义见文献[1]. 由可能的 n, l 值构成五个方程组, $B_{n,l,0}, B_{n,l,i}$ 各系数由文献[1]的(36a)–(36j)式给出. 其中散射函数 $f(e\xi)$ 用符合于 WHB 势的形式:

$$f(e\xi) = \frac{2.54(e\xi)^{1/2}}{[1 + (5.08(e\xi)^{3/2})^{1/2}]^2}, \quad (22)$$

ξ 的定义见文献[1]. 对于 H^+ 和 He^+ 离子,我们将 Ziegler 提供的电子阻止截面资料拟合成如下形式:

$$S_e = \frac{k\sqrt{E}}{1 + cE^p} (\text{eV} \cdot \text{cm}^2 \times 10^{-15}/\text{atom}). \quad (23)$$

用最小二乘法得到拟合参数 k, c, p . 那么与文献[1]中的(38)式对应的 $B_{n,l,1}^*$ 可写为

$$B_{n,l,1}^* = B_{n,l,1} + \sum_i N_i \frac{k_i \sqrt{E}}{1 + c_i E^{p_i}} \times 10^{-18} (\text{keV}/\text{cm}), \quad (24)$$

其中求和是对化合物或合金中各元素求和.

对于从 Li^+ 到 Ne^+ 各种离子,由我们给出的 S_e 公式得:

$$B_{n,l,1}^* = B_{n,l,1} + \begin{cases} \sum_i N_i f_1^2 \beta \eta Z_1^2 (S_{ep})_i \times 10^{-18} (\text{keV}/\text{cm}) & \text{当 } \frac{E}{m_1} \leq E_0, \\ \sum_i N_i f_2^2 \beta \eta Z_1^2 (S_{ep})_i \times 10^{-18} (\text{keV}/\text{cm}) & \text{当 } \frac{E}{m_1} > E_0. \end{cases} \quad (25)$$

表3 离子在非晶 Al_2O_3 , SiO_2 和 UO_2 中的投影射程分布参数
(Al_2O_3 的密度为 $3.70\text{g}/\text{cm}^3$, SiO_2 的密度为 $2.65\text{g}/\text{cm}^3$, UO_2 的密度为 $10.5\text{g}/\text{cm}^3$)

材料	离子	能量 keV	1	5	10	20	40	60	100	200	400	600	800	1000
Al_2O_3	Li^+	$R_p(\text{\AA})$	40.4	199.0	417.3	857.9	1685	2432	3753	6459	10460	13580	16170	18430
		$\Delta R_p(\text{\AA})$	29.5	107.9	187.9	306.4	463.2	564.3	693.4	864.5	1001	1082	1120	1146
		$\sqrt{\beta_1}$		-0.060	-0.309	-0.566	-0.970	-1.22	-1.58	-1.95	-2.66	-3.04	-3.29	-3.29
Al_2O_3	N^+	$R_p(\text{\AA})$	22.9	83.1	160.7	321.3	646.2	959.0	1539	2776	4740	6377	7831	9186
		$\Delta R_p(\text{\AA})$	14.6	44.8	77.5	132.4	218.8	283.6	375.8	509.0	632.5	704.6	749.0	782.8
		$\sqrt{\beta_1}$	0.538	0.296	0.129	-0.053	-0.381	-0.588	-0.869	-1.19	-1.72	-1.92	-2.19	-2.42
	Ne^+	$R_p(\text{\AA})$	20.1	64.9	119.7	236.4	490.6	758.7	1306	2635	4863	6708	8306	9732
		$\Delta R_p(\text{\AA})$	11.2	33.7	58.1	104.8	190.5	267.3	397.5	631.9	878.8	1013	1098	1157
		$\sqrt{\beta_1}$	0.621	0.484	0.378	0.247	-0.003	-0.171	-0.404	-0.723	-1.10	-1.29	-1.48	-1.63
SiO_2	B^+	$R_p(\text{\AA})$	39.2	164.5	334.4	688.2	1378	2014	3139	5401	8827	11630	14090	16210
		$\Delta R_p(\text{\AA})$	27.1	92.5	163.9	281.2	450.9	566.9	718.0	911.6	1075	1171	1225	1262
		$\sqrt{\beta_1}$	0.585		0.072	-0.185	-0.538	-0.754	-0.653	-1.14	-1.78	-2.05	-2.36	-2.57
SiO_2	O^+	$R_p(\text{\AA})$	30.1	105.1	200.9	404.6	832.9	1261	2080	3885	6795	9211	11350	13310
		$\Delta R_p(\text{\AA})$	18.3	56.6	98.7	175.4	304.8	409.1	566.4	806.2	1037	1167	1249	1311
		$\sqrt{\beta_1}$	3.04	0.423	0.262	-0.200	-0.200	-0.390	-0.653	-0.987	-1.45	-1.67	-1.90	-2.12
	F^+	$R_p(\text{\AA})$	29.1	96.6	180.9	360.7	747.9	1148	1943	3787	6909	9574	11900	13960
		$\Delta R_p(\text{\AA})$	16.6	50.6	88.0	158.5	284.1	392.1	566.3	856.7	1162	1340	1455	1535
		$\sqrt{\beta_1}$	4.82	0.473	0.351	0.121	-0.064	-0.238	-0.481	-0.806	-1.24	-1.46	-1.67	-1.83
UO_2	N^+	$R_p(\text{\AA})$	26.7	80.4	137.7	244.0	446.3	641.1	1015	1877	3393	4735	5983	7173
		$\Delta R_p(\text{\AA})$	24.3	70.1	115.6	189.6	314.7	416.0	577.7	843.5	1180	1377	1536	1663
		$\sqrt{\beta_1}$	0.238	-0.085	-0.170	-0.337	-0.337	-0.492	-0.640	-0.905	-1.22	-1.47	-1.64	-1.80
UO_2	F^+	$R_p(\text{\AA})$	24.3	69.7	117.5	206.7	379.9	551.1	891.1	1720	3283	4739	6095	7340
		$\Delta R_p(\text{\AA})$	20.7	58.6	96.8	162.9	280.4	382.9	559.1	891.4	1353	1664	1908	2098
		$\sqrt{\beta_1}$	0.826	-0.015	-0.109	-0.122	-0.258	-0.336	-0.455	-0.670	-0.940	-1.14	-1.29	-1.42

这里 N_i 的单位用 cm^{-3} , S_{ep} 的单位用 $\text{eV} \cdot \text{cm}^2 \times 10^{-15}/\text{atom}$. 一旦求得了系数 $B_{n,l,0}$, $B_{n,l,j}$ 和 $B_{n,l,1}^*$, 由方程组 (21) 可以依次求得 $M_{l,0}^n$, $M_{l,1}^n$, $M_{l,2}^n$, 则 M_l^n 可写为

$$M_l^n = M_{l,0}^n + M_{l,1}^n + M_{l,2}^n. \quad (26)$$

M_l^n 的定义见文献 [1]. 那么离子的平均投影射程 R_p , 平均投影射程的标准偏差 ΔR_p 及射程分布的不对称度 $\sqrt{\beta_1}$ 分别为

$$R_p = \langle r_p \rangle = M_1^1, \quad (27)$$

$$\Delta R_p = (\langle r_p^2 \rangle - \langle r_p \rangle^2)^{1/2} = \left[\frac{M_0^2 + 2M_2^2}{3} - (M_1^1)^2 \right]^{1/2}, \quad (28)$$

$$\sqrt{\beta_1} = \frac{\frac{3M_1^3 + 2M_3^3}{5} - 3R_p(\Delta R_p)^2 - R_p^3}{(\Delta R_p)^3}. \quad (29)$$

$B_{n,l,0}$, $B_{n,l,j}$ 系数以及方程组 (21) 的数值计算方法在文献 [1] 中有详细介绍, 这里不重复.

我们将部分离子在非晶 Al_2O_3 , SiO_2 , 20/25/Nb 不锈钢, LiNbO_3 和 UO_2 等材料中的 R_p , ΔR_p 和 $\sqrt{\beta_1}$ 值列于表 2 和表 3 中, 在这些材料中的各种离子的射程参数表, 我们将在别处给出.

图 4 给出 B^+ 离子注入 SiO_2 衬底的 R_p , ΔR_p 和 $\sqrt{\beta_1}$ 与离子能量 E 的关系. 图中实线是我们的计算, 虚线是 Gibbons 等人的计算^[23], 实验点是 Jahnel 等人的测量^[24], “+”是 Christel 和 Gibbons 新近的计算值^[25]. Jahnel 实验中用的 SiO_2 膜的密度为 $2.27\text{g}/\text{cm}^3$, 与我们在计算中用的 SiO_2 密度 $2.65\text{g}/\text{cm}^3$ 不同, 所以在图 4 中将我们的计算值做了相应的修正. 从图 4 可以看出, 我们的结果与实验符合得更好. 图 5 给出我们计算的 $^4\text{He}^+$ 离

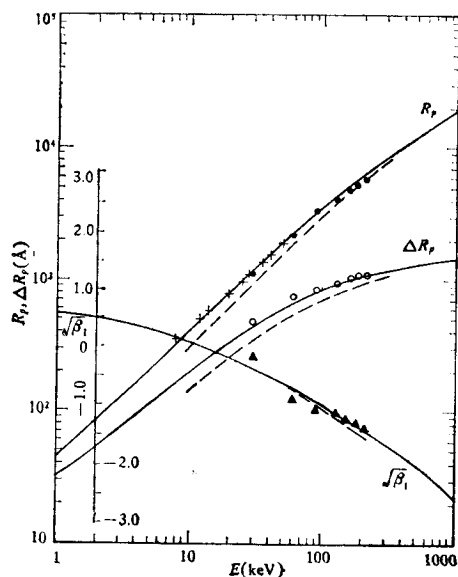


图 4

$\text{B}^+ \rightarrow \text{SiO}_2$; SiO_2 的密度; ρ 为 $2.27\text{g}/\text{cm}^3$

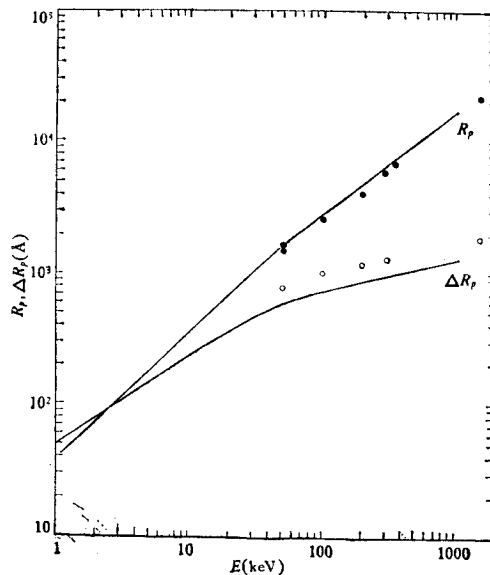


图 5

● 为 R_p ; ○ 为 ΔR_p

子注入 20/25/Nb 不锈钢中的 R_p , ΔR_p 与能量 E 的关系. 图 5 中的实验点是 Fink 等

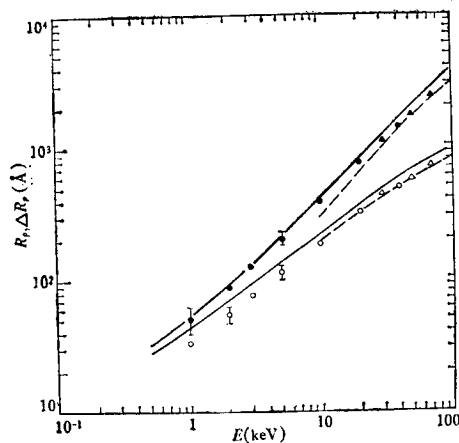


图 6

● (R_p), ○ (ΔR_p) 为 Wach 等人的实验^[27];
▲ (R_p), △ (ΔR_p) 为 Hofker 的实验^[28]

人测量的 $^3\text{He}^+$ 注入 Fe 的 R_p 和 ΔR_p 值^[26], 实线为本文的计算值. 尽管 $^4\text{He}^+$ 和 $^3\text{He}^+$ 分别在不锈钢和 Fe 中应该有略有不同的射程, 但仍可看出, 本文的理论计算提供了较好的 R_p 和 ΔR_p 随离子能量 E 的变化关系. 为了提供更多的理论与实验的比较, 我们也计算了上述各种离子在非晶 Si 中的射程参数. 图 6 给出了低能 B^+ 离子注入 Si 的 R_p 及其标准偏差 ΔR_p 与 E 的关系. 实线是本文的计算; 虚线是 Biersack 等人的计算^[24]; 实验点是 Wach 等人^[27]和 Hofker 等人^[28]的实验值. 我们的 R_p 值与实验符合得很好, 在能量 $E \approx 10\text{keV}$ 时, Biersack 的 R_p 值与实验已经有较大的偏离. Biersack 的 ΔR_p 值与实验符合得很好, 我们的 ΔR_p 值比实验值系统地偏高. Biersack 的方法不能提供高次矩. 从以上的实验和理论的比较可见, 我们计算的平均投影射程 R_p 在低能区与实验的符合程度比别人的有所改进.

四、讨 论

由于本文采用了与实验符合得较好的电子阻止截面以及比较符合实际情况的 WHB 核散射势, 所以提供的离子投影射程分布矩是建立在较为可靠的实验基础上的. 在本文考虑的能量范围的低能端, 我们的 R_p 值与实验符合的程度比其他人更好. 就我们给出的大多数离子-靶材料组合而言, 还没有实验资料与之比较, 也没有其他人的理论计算与之对照. 然而由以上给出的例子使我们相信, 在实验误差范围内, 我们给出的离子射程值能正确地反映实验规律.

本文给出的低能离子 ($0.1 \leq \frac{E}{m_1} \leq 150\text{keV/amu}$) 的电子阻止公式 (11)–(16) 既含有随离子速度而变的因子 f_1 , f_2 和 β , 又含有随离子品种而变化的 Z_1 振荡因子 η , 同时含有随靶材料而变的 S_{cp} , 因此能反映电子阻止截面 S_e 的 Z_1 , Z_2 -振荡规律以及 S_e 随离子能量 E 变化的规律. 虽然随着今后实验精度的提高, 拟合参数 a , b 和 α 可能需要进一步调整, 公式中的数字系数也可能需要调整, 但这些公式的形式是相当有效的.

我们在计算化合物和合金中的电子阻止截面时用了 Bragg 规则. Pietsch 等人讨论了 Bragg 规则的适用性问题^[12], 然而就目前低能 S_e 的实验精度而言, 要验证化合物靶中的化学效应 (即偏离 Bragg 规则的程度) 是困难的, 尽管 Pietsch 等人认为他们用反 Doppler 频移衰减法测定的离子在材料中的阻止本领的精度可达 1%, 然而 Andersen 指出过^[22], 反 Doppler 频移法测得的数据与其它方法不一致. 因此, 对于 Doppler 频移法揭示的化

学效应的可靠性尚有待于进一步考虑。尽管人们知道化合物中的化学效应是肯定存在的,但目前尚没有更可靠的规则代替 Bragg 规则来有根据地反映这种化学效应。所以目前化合物中的射程计算和离子束分析工作,绝大多数人仍采用 Bragg 规则。

有了射程分布参数 R_p , ΔR_p 和 $\sqrt{\beta_1}$, 可以利用它们来预见离子注入无定型材料中的射程分布。在偏离对称不太严重的情况下,可以用 Edgeworth 分布或 Pearson 分布来描述。例如可以用 Edgeworth 分布:

$$n(x) = \frac{N_d}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \exp\left[-\frac{(x-R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right] \cdot P\left(\frac{x-R_p}{\Delta R_p}\right). \quad (30)$$

这里 x 表示垂直于表面的深度, N_d 是注入剂量, $n(x)$ 是注入的杂质体浓度分布。令 $\frac{x-R_p}{\Delta R_p} \equiv X$, 则函数 $P\left(\frac{x-R_p}{\Delta R_p}\right)$ 可写为

$$P(X) = 1 + \frac{\sqrt{\beta_1}}{6} (X^3 - 3X) + \frac{\beta_2 - 3}{24} (X^4 - 6X^2 + 3) + \frac{\beta_1}{72} (X^6 - 15X^4 + 45X^2 - 15) + \dots, \quad (31)$$

β_2 是四次中心矩比, 我们只给出了三次矩, 因此采用 Gibbons 等人的方法^[23], 选取 β_1 和 β_2 之间的关系: $\beta_2 = 3 + \frac{5}{3}\beta_1$ 以使 $P(0) = 1$ 。则注入杂质的浓度分布可写为

$$n(x) = \frac{N_d}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \exp\left[-\frac{X^2}{2}\right] \left[1 + \frac{\sqrt{\beta_1}}{6} (X^3 - 3X) + \frac{5\beta_1}{72} (X^4 - 6X^2 + 3) + \frac{\beta_1}{72} (X^6 - 15X^4 + 45X^2 - 15) + \dots\right]. \quad (32)$$

关于从实验测得的杂质浓度分布曲线中确定射程分布参数的问题,我们将另文讨论。

参 考 文 献

- [1] 夏曰源、杨洪、谭春雨、李金华, 物理学报, **32**(1983), 423.
- [2] J. H. Ormrod, J. R. MacDonald and H. E. Duckworth, *Can. J. Phys.*, **43** (1965), 275.
- [3] J. H. Ormrod and H. E. Duckworth, *Can. J. Phys.*, **41** (1963), 1424.
- [4] P. Hvelplund and B. Fastrup, *Phys. Rev.*, **165** (1968), 408.
- [5] P. Mertens, *Nucl. Instr. and Meth.*, **149** (1978), 149.
- [6] D. G. Simons *et al.*, *Phys. Rev. A*, **12** (1975), 2383.
- [7] D. J. Land *et al.*, *ibid.*, **22** (1980), 68.
- [8] W. D. Wilson, L. G. Hagmark and J. P. Biersack, *Phys. Rev. B*, **15** (1977), 2458.
- [9] J. Lindhard and M. Scharff, *Phys. Rev.*, **24** (1961), 128.
- [10] O. B. Firsov, *Sov. Phys. JETP*, **9** (1959), 1076.
- [11] D. J. Land *et al.*, *Phys. Rev. A*, **16** (1977), 492.
- [12] W. Pietsch *et al.*, *Nucl. Instr. and Meth.*, **132** (1976), 79.
- [13] 王德宁、王渭源, 物理学报, **31**(1982), 348.
- [14] I. M. Cheshire *et al.*, *Phys. Lett. A*, **27** (1968), 318.
- [15] C. P. Bhalla *et al.*, *Atomic Collision Phenomena in Solids*, Eds. D. W. Palmer *et al.*, North-Holland Publ. Co., Amsterdam (1970).

- [16] W. Brandt, *Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res.*, **194** (1982), 13.
- [17] M. D. Brown and C. D. Moak, *Phys. Rev. B*, **6** (1972), 90.
- [18] J. F. Ziegler, *Nucl. Instr. and Meth.*, **168** (1980), 17.
- [19] J. F. Ziegler, Helium Stopping Powers and Ranges in All Elements, Pergamon Press, New York, (1977).
- [20] P. Mertens and Th. Krist, *Nucl. Instr. and Meth.*, **168** (1980), 33.
- [21] H. H. Andersen and J. F. Ziegler, Hydrogen Stopping Powers and Ranges in All Elements, Pergamon Press, New York, (1977).
- [22] H. H. Andersen, *et al.*, *Nucl. Instr. and Meth.*, **168** (1980), 75.
- [23] J. F. Gibbons, W. S. Johnson and S. W. Mylroie, Projected Range Statistics, Semiconductors and Related Materials, 2nd ed., Dowden, Hutchinson and Ross Inc., Stroudsburg Pennsylvania, (1975).
- [24] F. Jahnel *et al.*, *Nucl. Instr. and Meth.*, **182/183** (1981), 223.
- [25] L. A. Christel, J. F. Gibbons and S. Mylroie, *ibid.*, (1981), 187.
- [26] D. Fink *et al.*, *Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res.*, **194** (1982), 194.
- [27] W. Wach and K. Wittmaack, *ibid.*, (1982), 113.
- [28] W. K. Hofker *et al.*, *Rad. Effects*, **24** (1975), 228.

CALCULATION OF PROJECTED ION-RANGE DISTRIBUTION MOMENTS IN COMPOUNDS AND ALLOYS (II)

RANGE DISTRIBUTION MOMENTS FOR LIGHT IONS ($Z_1 \leq 10$)

Xia Yue-yuan Yang Hong Tan Chun-yu Sun Xiu-fang Gao Shou-wen
(Shandong University, Jinan)

ABSTRACT

An empirical formula of electronic Stopping Cross Section, S_e , for low energy ions, such as Li^+ , Be^+ , B^+ , C^+ , N^+ , O^+ , F^+ , and Ne^+ , in solid materials is established according to the experimental electronic stopping power data in solid media. The formula can be used not only to describe the experimental Z_1 and Z_2 -oscillation of electronic stopping power, but also to describe very satisfactorily the S_e varying with ion energy, E . The projected range distribution moments up to third order for ten light ion species from H^+ to Ne^+ in different substrates, such as amorphous Al_2O_3 , SiO_2 , 20/25/Nb stainless steel, LiNbO_3 and UO_2 , are calculated by use of the electronic stopping cross section formula proposed by the present authors and the nuclear scattering function which agrees with the WHB atomic interaction potential. Our theoretical results are compared with the experimental results published recently, and our projected ranges, R_p , agree with the experimental measurements more closely in the low energy end of the energy regime which we deal with in the present work.