

硼注入砷化镓的电子阻止本领

程 兆 年 王 渭 源

(中国科学院上海冶金研究所)

1984 年 10 月 4 日收到

提 要

由文献上 R_p 的实验数据,用相对校正法和我们编制的 LSS 方程数值求解程序,算得 $B^+ \rightarrow GaAs$ 的电子阻止本领为

$$NS_e(E) = 12.4E^{0.605},$$

以及 $B^+ \rightarrow GaAs$ 的射程统计参数 R_p , ΔR_p 和 R_L .

一、引 言

靶材料对入射离子的阻止,常用核阻止本领 S_n 和电子阻止本领 S_e 来表征. 入射离子较轻、能量 E 较高时, S_e 起主要作用.

Lindhard 等人^[1]将固体靶中的电子近似为密度均匀的电子气, Firsov^[2] 基于碰撞时原子间的电子动量传递,提出了计算 S_e 的不同公式. 两者均使用了 Thomas-Fermi 原子统计模型,都得出 S_e 正比于入射粒子速度,即 $S_e \propto \sqrt{E}$. 有些作者^[3-5]考虑了电子壳层修正,从而可解释若干给定能量下的实验结果,不过理论上仍不脱离 $S_e \propto \sqrt{E}$. 但实验表明,上述 S_e 的能量关系常不满足,而呈 $S_e \propto E^p$ 或其他函数形式^[6]. 由于 S_e 实验数据不足,给理论工作带来一定困难,需要进一步积累离子注入的实验数据,或者发展一些新的测定 S_e 的实验方法(如 IDSA 法^[7]). S_n 的物理模型和计算比较清楚,除低能情形外,可由两体碰撞和 Thomas-Fermi 势,以及基本物理常数计算得到可靠的结果^[8].

根据 Lindhard 等人建立起来的输运方程(LSS 方程)^[9,10]和经验 $S_e(E)$,计算得到的射程统计参数 R_p , ΔR_p , R_L 与实验值十分符合. 因此,认真地从 R_p 实验数据中分析解出 S_e ,不但必要,而且可能.

二、硼注入砷化镓的射程

近年来很多作者研究了 GaAs 中离子注入问题,但注入 III 族和 V 族元素的研究屈指可数. 其中 $B^+ \rightarrow GaAs$, Davies 等人^[11]仅研究了 1MeV 下 B^+ 注入的电学活性,没有给出注入后的分布. 以后, Rao 等人^[12]用 SIMS 给出了 B^+ 注入后的深度分布,但亦仅有 1MeV 下一个数据. 最近, Toulouse 等人^[13]也用 SIMS 给出了 $E = 200, 400, 1000, 2000$ keV 下的 B^+ 分布,这是迄今为止最为系统的实验结果. Toulouse 等人给出的投影射程

R_p (实测 B^+ 分布峰值位置) 列于表 1.

表 1 R_p 实验值和各种计算值的比较

$E(\text{keV})$	200	400	1000	2000	求解 LSS 方程时所用的 $NS_e(E)$ 表式
R_p 实验值 (μm)	0.55	0.94	1.78	2.75	
R_p 计算值 (μm)	0.4932	0.9017	1.8193	2.9160	Lindhard 法 $NS_e(E) = 23.0E^{0.5}$
	0.5042	0.9021	1.7516	2.7144	Simons 法 $NS_e(E) = 16.1E^{0.567}$
	0.5280	0.9403	1.8005	2.7498	相对校正法 $NS_e(E) = 12.4E^{0.605}$

采用 Lindhard 等人的 $E^{\frac{1}{2}}$ 表式^[1,14], 得

$$NS_e(E) = 23.0E^{0.5}, \quad (1)$$

式中 N 为靶材料原子 (此处是 GaAs) 密度. 然后代入我们编制的 LSS 方程数值求解程序^[14], 计算了 R_p (见表 1). 与 Toulouse 等人实验结果比较表明, 在低能端计算值偏低, 高能端偏高, 说明 E 的指数应大于 0.5.

Simons 等人^[15] 提出由不同能量下实测的 R_p 值按下式扣除 $S_n(E)$ 的贡献从而确定 $NS_e(E)$ 为

$$NS_e(E) = [1 - \beta_{110}(E)R_p(E)] \frac{dE}{dR_p} - \beta_{111}(E), \quad (2)$$

$$\beta_{110}(E) = N \int d\sigma_n \cdot T \cos\theta, \quad \beta_{111}(E) = N \int d\sigma_n \cdot (1 - \cos\theta), \quad (3)$$

式中 $d\sigma_n = d\sigma_n(E, T)$ 为离子与靶原子核碰撞的微分散射截面; T 为一次碰撞中离子传递给靶原子核的能量; $\cos\theta = \cos\theta(E, T)$ 为散射角. 具体表式可参见文献 [14]. 最后, 式中 $\frac{dE}{dR_p}$ 由实验 R_p - E 曲线确定. 将 $\log R_p$ - $\log E$ 近似为直线, 用最小二乘法得

$$R_p = 0.0124E^{0.72}. \quad (4)$$

由此可算得 $\frac{dE}{dR_p}$, 代入(2)式, 再用最小二乘法得

$$NS_e(E) = 39.4E^{0.422}. \quad (5)$$

但按(5)式计算所得到的 R_p 比按(1)式所得到的更差(略). 为此将 $\log R_p$ - $\log E$ 近似为抛物线, 得

$$\log R_p = -6.133 + 1.286(\log E) - 0.04552(\log E)^2, \quad (6)$$

$$NS_e(E) = 16.1E^{0.567}, \quad (7)$$

代入 LSS 方程求解程序得到 R_p 值. (7)式所得 R_p (见表 1)比(1)式接近实验值, 但普遍偏低, 说明 $\frac{dE}{dR_p}$ 仍存在系统偏差, 这是因为 R_p 数据太少, 数值处理得到的 $\frac{dE}{dR_p}$ 精度难以满足要求.

为精确计, 我们曾在(2)式中引入 Simons 略去的含 $\beta_{112}(E)$, $\beta_{113}(E)$ 的高阶项. 计算表明, 高阶项比一阶项小三个数量级, 因此可以忽略.

三、相对校正法及数值计算结果

鉴于以上方法给出的 $NS_c(E)$ 不够好,我们提出由实验 $R_p(E)$ 确定 $NS_c(E)$ 的相对校正法,以避免使用 $\frac{dE}{dR_p}$.

定义纯电子阻止下的全射程 $R_c(E)$

$$R_c(E) = \int_0^E \frac{dE}{NS_c(E)}, \quad (8)$$

其逆运算由 $R_c(E)$ 给出 $NS_c(E)$. 取

$$NS_c(E) = aE^p, \quad (9)$$

则

$$R_c(E) = \frac{1}{a(1-p)} E^{1-p}. \quad (10)$$

设 NS_c 的 n 级近似为 $NS_c^{(n)}$. 由(8)式得 $R_c^{(n)}$, 通过数值求解 LSS 方程计算程序, 得该 $NS_c^{(n)}$ 下的 $R_p^{(n)}$. 因为 NS_m 由基本物理常数算得, 在每次计算中贡献不变, 故可认为 $R_p^{(n)}$ 与实验值 $R_{p,exp}$ 之差系 $NS_c^{(n)}$ 取得不当所致. 取用下式的比例校正以确定相对于 R_p 的 $(n+1)$ 级校正量 $R_c^{(n+1)}$:

$$\frac{R_c^{(n+1)}}{R_c^{(n)}} = \frac{R_{p,exp}}{R_p^{(n)}}. \quad (11)$$

据此得各实测能量下的 $R_c^{(n+1)}$ 值, 及 $NS_c^{(n+1)}$ 表式中的参数 a, p .

计算中取用(1)式为 $NS_c(E)$ 的零级近似, 迭代循环至 $R_c^{(n)}$ 收敛, 亦即满足

$$\frac{1}{m} \left| \sum_i (R_{p,exp} - R_p^{(n+1)})^2 - \sum_i (R_{p,exp} - R_p^{(n)})^2 \right| < \varepsilon, \quad (12)$$

ε 为截断精度, m 为实验数据点数. 方差和 $\sum_i (R_{p,exp} - R_p^{(n)})^2$ 值与实验数据分散度有关, 从而制约了 $NS_c(E)$ 的精度.

取

$$\varepsilon = \left[\frac{1}{1000} R_{p,exp(max)} \right]^2, \quad (13)$$

式中 $R_{p,exp(max)}$ 表示 Toulouse 文中最大的实验 R_p 值 ($E = 2000\text{keV}$). 计算所得 $B^+ \rightarrow \text{GaAs}$ 的 $NS_c(E)$ 为

$$NS_c(E) = 12.4E^{0.605}, \quad (14)$$

相应的 R_p 计算值(表 1)与实验值的平均绝对差 $\frac{1}{n} \sum_i |R_{p,exp} - R_{p,cal}| = 0.01\mu\text{m}$, 与实验十分相符.

利用(14)式, 由 LSS 方程计算了 $B^+ \rightarrow \text{GaAs}$ 的射程统计参数, 连同 $NS_n, R, R_p, \Delta R_p, R_{\perp}$ 一并列于表 2.

值得指出, 表 2 中 ΔR_p 计算值与文献[11]的实测 B^+ 分布也相符合, 而且 R_p 和 ΔR_p

表2 硼注入砷化镓的射程统计参数

注入能量 $E(\text{keV})$	电子阻止本领 $NS_e(\text{keV}/\mu\text{m})$	核阻止本领 $NS_n(\text{keV}/\mu\text{m})$	全射程 $R(\mu\text{m})$	投影射程 $R_p(\mu\text{m})$	投影射程均方差 $\Delta R_p(\mu\text{m})$	横向射程 $R_{\perp}(\mu\text{m})$
10	49.9	87.1	0.0942	0.0249	0.0231	0.0324
20	76.0	77.2	0.1629	0.0505	0.0404	0.0578
50	132.2	56.3	0.3387	0.1341	0.0826	0.1233
100	201.1	40.1	0.5720	0.2743	0.1316	0.2064
150	257.0	31.9	0.7609	0.4060	0.1651	0.2682
200	305.9	26.7	0.9219	0.5280	0.1897	0.3163
300	390.9	20.6	1.1911	0.7472	0.2238	0.3875
400	465.2	16.9	1.4151	0.9403	0.2467	0.4385
500	532.5	14.5	1.6095	1.1137	0.2632	0.4775
600	594.6	12.7	1.7829	1.2718	0.2758	0.5079
800	707.6	10.3	2.0850	1.5533	0.2939	0.5539
1000	809.9	8.7	2.3454	1.8003	0.3064	0.5872
1200	904.3	7.6	2.5767	2.0226	0.3157	0.6126
1400	992.7	6.7	2.7860	2.2251	0.3229	0.6327
1600	1076.2	6.1	2.9782	2.4121	0.3287	0.6492
1800	1155.7	5.5	3.1565	2.5863	0.3335	0.6629
2000	1231.8	5.1	3.3233	2.7498	0.3375	0.6745

与 Magee 等人最近研究离子注入造成 Ga, As 原子比例偏离的 $B^+ \rightarrow \text{GaAs}$ 的 50, 100 keV 下的 SIMS 结果相一致^[16].

参 考 文 献

- [1] J. Lindhard and A. Winther, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, **34** (4) (1964).
- [2] O. B. Firsov, *J. Exper. Theoret. Phys. (USSR)*, **36** (1959), 1517.
- [3] W. Pietsch, V. Haoser and W. Neuwirth, *Nucl. Instr. Methods*, **132** (1976), 79.
- [4] D. J. Land and J. G. Brennan, *Nucl. Instr. Methods*, **132** (1976), 89.
- [5] 王德宁、王渭源, 物理学报, **31**(1982), 348.
- [6] J. F. Gibbons, W. S. Johnson and S. M. Mylroie, *Projected Range Statistics*, 2nd ed., Halstead Press, (1975).
- [7] W. Neuwirth, W. Pietsch and R. Kreutz, *Nucl. Instr. Methods*, **149** (1978), 105.
- [8] 王德宁、程兆年、王渭源, 物理学报, **29**(1980), 1452.
- [9] J. Lindhard, M. Scharff and H. Schiøtt, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, **33** (14) (1963).
- [10] J. B. Sanders, *Can. J. Phys.*, **46** (1968), 455.
- [11] D. E. Davies, J. K. Kennedy and A. C. Yang, *Appl. Phys. Lett.*, **23**(1973), 615.
- [12] E. V. K. Rao, N. Duhamel, P. N. Favennec and H. L' Haridon, *J. Appl. Phys.*, **49** (1978), 3898.
- [13] B. Toulouse, P. N. Favennec, A. Guivar'ch and G. Pelous, *Proc. of 7th Int. Symp. on Gallium Arsenide and Related Compounds*, ed. by C. M. Wolfe, Bristol and Landon, (1979), p. 501.
- [14] 程兆年、朱文玉、王渭源, 物理学报, **31**(1982), 922.
- [15] D. G. Simons, D. J. Land, J. G. Brennan and M. D. Brown, *Proc. of 5th Int. Conf. on Ion Implantation in Semiconductors*, ed. by F. Chernow *et al.*, Plenum Press, (1976), p. 703.
- [16] T. J. Magee, H. Kawayoshi and R. D. Ormond, *Appl. Phys. Lett.*, **39**(1981), 906.

ELECTRONIC STOPPING POWER OF B⁺ IMPLANTATION IN GaAs

CHENG ZHAO-NIAN WANG WEI-YUAN
(*Shanghai Institute of Metallurgy, Academia Sinica*)

ABSTRACT

Based on published experimental data of R_p , a proposed relative correction method combining with numerical solution program of LSS equation was used to calculate the electronic stopping power of B⁺ implantation in GaAs, as follows

$$NS_e(E) = 12.4E^{0.605},$$

Using this expression, the range statistic parameters R_p , ΔR_p and $R_{\perp}$ for B⁺ implanted GaAs were calculated.