

多层介质中的离子射程分布*

夏日源 徐现刚 张兆林 谭春雨

山东大学物理系

杨 洪 孙秀芳

山东大学计算机科学系

1988年11月8日收到

本文提出了一种计算多层介质中注入离子深度分布的新方法。该方法把 Monte Carlo 模拟与输运方程的数值解法相结合,取其各自的优点,考虑了离子在界面处的反射,给出多层介质中射程分布表达式。理论与实验比较表明,两者符合得很好。

一、引 言

近几年,多层介质中的离子射程分布研究受到了重视,人们在理论上^[1-3]和实验上^[4-8]进行了研究。离子贯穿多层介质是离子束技术应用的重要方面。例如,半导体集成电路制造常需要透过 SiO₂ 和其它钝化膜进行离子注入,也常用离子束诱发金属膜和半导体衬底间的界面反应而形成好的欧姆接触。离子注入半导体异质结及金属-绝缘体界面是制造激光和超导元件的重要方法。金属表面的抗腐蚀、耐磨损防护层,聚变反应堆第一壁的保护镀层以及新近出现的超晶格都往往是多层结构的,离子束在这些材料中的应用,需要多层介质中离子射程分布的知识。

已有的多层介质中离子射程计算方法主要有三种。第一种为 Monte Carlo 模拟,其中有代表性的为 TRIM 程序^[9]。其优点是容易严格考虑离子在表面和界面的行为,能给出离子在空间的能量和角分布,因此能方便地模拟离子在多层介质中的射程分布。其缺点是花费计算机时长,计算时间随离子的能量增高而增长。另外, Monte Carlo 模拟对离子注入多层介质,只能给出分布图,不容易给出一个解析表达式。

第二种为解析近似法。这类方法利用均匀体材料中射程分布矩,借助密度变换近似^[12,13],或等效原子阻止法 (MEAS)^[14],构造多层介质中的射程分布。尽管这类方法计算速度快,在一些情况下能较好地给出多层介质中的射程分布,但这类模型在不同程度上用了一些不够严格的假定,当各层的阻止本领差别很大时,这些模型的可靠性需进一步验证。

另一类方法为数值解 Boltzmann 输运方程^[9,10],与均匀介质中的 LSS 输运方程相比,该法较复杂,这在一定程度上限制了其广泛应用。因此,有必要提出一种可靠而又较简便的方法,这正是本文要解决的问题。

* 国家自然科学基金资助的课题。

二、计算方法

对于均匀介质中离子射程的计算,已经有了成熟的计算程序.除了基于 Monte Carlo 模拟的 TRIM 外,由 LSS 理论^[11]出发,用射程分布矩的方法^[12]取得了很大成功.这种数值解 LSS 输运方程的方法,计算效率很高,目前已出版了很多射程分布矩的数据^[13-15].但这种方法只能用于均匀介质,无法直接用于多层介质.但是一个多层结构,每层介质是均匀的,既然用输运方程和矩的方法容易计算各层对应的射程参数,就可以用它们构造多层介质中的射程分布.困难的是当一束单能离子透射一层介质时,出射能量和出射角是未知的,因此无法计算下一层介质内的离子射程.若用 Monte Carlo 模拟,可给出各层界面处离子的能量和出射角,用这些数据作为下一层介质中的输入数据,可用输运方程法给出下一层介质中的离子分布.对多数的实际应用,上层介质膜较薄,用 Monte Carlo 模拟给出离子透射各层的出射能谱和角分布只需花费较短的计算机时.这样 Monte Carlo 模拟结合输运方程解法,既可给出各层中严格的分布,花费的计算机时又较短,又可用分布矩的方法给出各层中射程分布的解析表达.下面将介绍具体的计算方法.

先计算离子透射薄膜的能谱和角分布.假定一个能量为 E_0 , 质量为 m_1 , 原子序数为 Z_1 的离子贯穿厚度为 D_1 的非晶膜,为了论述方便,假定这层膜由质量为 m_2 , 原子序数为 Z_2 的原子构成,必要时很容易推广到多组元靶,按照经典散射理论,离子与靶原子发生碰撞的散射角为

$$\theta = \pi - 2p \int_{r_0}^{\infty} \frac{dr}{r^2 [1 - V(r)/E_r - p^2/r^2]^{1/2}}, \quad (1)$$

其中 θ 为质心系散射角, p 为碰撞参数, $V(r)$ 为原子相互作用势, r 为相碰撞的原子间距, r_0 为两碰撞原子可接近的最近距离, $E_r = \frac{m_2}{m_1 + m_2} E_0$, r_0 由如下方程解得

$$1 - V(r_0)/E_r - p^2/r_0^2 = 0. \quad (2)$$

经过一次核碰撞,入射离子损失的能量为

$$T_n = \gamma E_0 \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (3)$$

其中 $\gamma = \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2}$. 要精确地求得 T_n , 需用精确的原子相互作用势 $V(r)$. 本文采用了 BZ 普适势^[16]

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \phi\left(\frac{r}{a}\right), \quad (4)$$

其中屏蔽长度

$$a = \frac{0.8854 a_0}{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}}, \quad (5)$$

$a_0 = 0.529 \text{ \AA}$ 为 Bohr 半径. 屏蔽函数可表示为^[17]

$$\begin{aligned} \phi(x) = & 0.1818 \exp(-3.2x) + 0.5099 \exp(-0.9423x) \\ & + 0.2802 \exp(-0.4029x) + 0.02817 \exp(-0.2016x), \end{aligned} \quad (6)$$

其中 $x = r/a$. (1)式中碰撞参数 p 的选取原则与 TRIM 相同,对于较薄的表面膜,采用 TRIM 的固定自由程情况下的碰撞参数,即^[9]

$$p = [R_n / (\pi N^{2/3})]^{1/2}, \quad (7)$$

其中 R_n 为均匀分布于 0 和 1 之间的随机数, N 为靶原子密度. 原则上需要数值计算方程(1)才能求得散射角 θ . 由于每个离子经历次数众多的碰撞,要得到良好的统计又需要跟踪数目众多的离子,那么计算(1)式的散射积分花费的时间太长. TRIM 程序的一个最突出优点是用一个散射角解析公式代替散射积分,计算时间大大缩短,而只损失微小的计算精度. 在我们的模拟中,也采用了这种方式,即散射角表示为

$$\cos \frac{\theta}{2} = \frac{p + \rho + \delta}{r_0 + \rho}. \quad (8)$$

其中 ρ 和 δ 的表达式和拟合常数的取法可参阅文献[17]. 由(3)和(8)式能求得每次核散射离子损失的能量. 另一关键问题是决定电子阻止造成的能量损失. 我们曾提出了一个由质子的阻止本领标度重离子的电子阻止本领的方法^[18], 这种方法确定的电子阻止本领与实验值符合得很好,所以我们的模拟采用了这种方法. 具体公式由文献[18]给出. 由文献[18]得到电子阻止截面 $S_e(10^{-15} \text{eVcm}^2/\text{at})$ 之后,电子阻止本领可表示为

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = NS_e \times 10^{-26} (\text{keV}/\text{\AA}). \quad (9)$$

离子每次碰撞路程中由于电子阻止造成的能量损失为

$$T_e = L \left(\frac{dE}{dx}\right)_e. \quad (10)$$

其中 L 为碰撞自由程.

假定核散射能量损失与电子能量损失为互相独立的过程, 每经一次碰撞离子损失的总能量为 $T_n + T_e$. 在多组元介质的情况下,另一个重要问题是离子与何种靶元素的原子碰撞的选择,我们用了与 TRIM 相同的选取原则^[19].

既然求得了每次碰撞的 T_n 和 T_e , 那么追踪离子的运动,直至离子透射膜的界面,可求得离子透射膜时的能量. 散射角不仅决定核散射的能量传递,也决定离子的运动方向. 为了确定离子运动方向,用实验室坐标系散射角 ψ 进行描述. ψ 与 θ 之间的关系为

$$\psi = \arctan\{\sin \theta / [\cos \theta + (m_1/m_2)]\}. \quad (11)$$

假定介质是横向均匀的,因此散射方位角 Φ 是随机的,即

$$\Phi = 2\pi R_n. \quad (12)$$

设离子运动方向与表面法线方向间的夹角为 α , 用 i 表示散射次数的标号,那么第 i 次碰撞后的 α_i 角为

$$\cos \alpha_i = \cos \alpha_{i-1} \cos \phi_i + \sin \alpha_{i-1} \sin \phi_i \cos \Phi_i. \quad (13)$$

跟踪离子运动,可以确定其运动方向,直到离子透射膜的界面. 以离子的人靶点为原点,深度坐标以 z 表示,那么离子离表面的距离为

$$z = z_0 + \sum_i L_i \cos \alpha_i, \quad (14)$$

一般情况下 z_0 可取为零, L_i 为第 i 次碰撞的自由程. 若离子从前表面反射或能量降到

5eV 以下就停止追踪,碰撞到某一次 $i = i_0$ 时,如果有 $(D_i - z)/\cos \alpha_{i_0}$ 小于自由程 L_{i_0} 时,离子为真正的透射离子. 离子透射膜时的能量为

$$E = E_0 - \sum_i (T_{ni} + T_{ei}) - T_{ei} \cdot L_{i_0}. \quad (15)$$

出射偏转角就为 α_{i_0} . 记录下相应的出射离子数,就得到离子透射薄膜的能谱和角分布. 我们的程序设计成可计算离子透射多层膜时在各层界面处的能谱和角分布. 用这些信息,可以用矩的方法计算各层介质中的射程分布. 数值解 LSS 输运方程的方法计算效率很高,例如计算 1keV—1MeV 的离子在二元化合物中的射程分布的一阶至三阶矩,在 FACOM M340 计算机上需要的 CPU 时间约一分半钟. 近几年我们用 XYTL 程序^[15]计算了很多介质中离子射程分布矩,所以我们将均匀介质中离子射程分布矩作为已知的,不再叙述其计算方法. 然而用矩的方法处理多层介质存在困难,因为每层介质界面处离子有一定的角分布,所以需要考虑斜入射情况下的射程分布,需要考虑斜入射时离子从界面处的反射. 由于考虑反射的困难,所以迄今我们没有发现其他人用矩的方法处理过斜入射条件下的射程. 最近双分模型处理离子输运的方法^[20]可以用来解决斜入射的离子射程问题^[21]. 我们这里给出采用矩的方法解决斜入射情况下的离子射程的方法. 对垂直入射的离子,最简单的情况可以用一阶和二阶矩构造射程分布,离子的分布为

$$n(x, y, z) = \frac{N_d}{(\sqrt{2\pi})^3 R_\perp^2 \cdot \Delta R_p} \exp\left[-\frac{(z - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right] \cdot \exp\left[-\frac{x^2 + y^2}{2R_\perp^2}\right], \quad (16)$$

其中 N_d 为入射离子总数, R_p 为平均投影射程, ΔR_p 为平均投影射程歧离, $R_\perp$ 为横向射程歧离,它们与离子在空间的几率密度 $P(r, n, E)$ 的空间矩之间的关系为^[15]

$$R_p = M_1^z, \quad (17)$$

$$\Delta R_p = \left[\frac{M_0^z + 2M_2^z}{3} - (M_1^z)^2\right]^{1/2}, \quad (18)$$

$$R_\perp = \left[\frac{2M_0^\perp - 2M_2^\perp}{3}\right]^{1/2}, \quad (19)$$

斜入射情况下,空间矩的意义不变,那么斜入射情况下只需要考虑坐标转动变换,并考虑离子在界面处的反射系数. 将(16)式对整个空间积分恰巧等于入射的离子总数,即

$$\begin{aligned} & \frac{N_d}{(\sqrt{2\pi})^3 R_\perp^2 \Delta R_p} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{(z - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right] dz \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \\ & \cdot \exp\left[-\frac{x^2 + y^2}{2R_\perp^2}\right] = N_d. \end{aligned} \quad (20)$$

既然 x 和 y 方向是对称的,那么可以只在纵向(z 方向)和横向(x 方向)两个方向考虑问题. 设离子的入射角为 α ,仍以入射离子的初始方向为 z' 方向,横向为 x' 方向,在原来的坐标系中离子的分布应为

$$\begin{aligned} N(x, z) = & \frac{N_d}{(\sqrt{2\pi})^2 R_\perp \Delta R_p} \exp\left[-\frac{(z \cos \alpha - x \sin \alpha - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right] \\ & \cdot \exp\left[-\frac{(x \cos \alpha + z \sin \alpha)^2}{2R_\perp^2}\right], \end{aligned} \quad (21)$$

在 $z < 0$ 的空间内的离子总数就是反射的离子数

$$N_1 = \frac{N_d}{(\sqrt{2\pi})^2 R_1 \Delta R_p} \int_{-\infty}^0 dz \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left[-\frac{(z \cos \alpha - x \sin \alpha - R_p)^2}{2 \Delta R_p^2} \right] \cdot \exp \left[-\frac{(x \cos \alpha + z \sin \alpha)^2}{2 R_1^2} \right], \quad (22)$$

由(22)式得

$$\begin{aligned} N_1 &= \frac{N_d}{\sqrt{2\pi} (R_1^2 \sin^2 \alpha + \Delta R_p^2 \cos^2 \alpha)^{1/2}} \int_{-\infty}^0 dz \exp \left\{ -\frac{(z - R_p \cos \alpha)^2}{2 (R_1^2 \sin^2 \alpha + \Delta R_p^2 \cos^2 \alpha)} \right\} \\ &= \frac{N_d}{\sqrt{\pi}} \int_{R_p \cos \alpha}^{\infty} \frac{\exp(-\xi^2) d\xi}{\sqrt{2} (R_1^2 \sin^2 \alpha + \Delta R_p^2 \cos^2 \alpha)^{1/2}} \\ &= \frac{N_d}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{R_p \cos \alpha}{\sqrt{2} (R_1^2 \sin^2 \alpha + \Delta R_p^2 \cos^2 \alpha)^{1/2}} \right), \end{aligned} \quad (23)$$

那么反射离子占的分额,即反射系数为

$$\frac{N_1}{N_d} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{R_p \cos \alpha}{\sqrt{2} (R_1^2 \sin^2 \alpha + \Delta R_p^2 \cos^2 \alpha)^{1/2}} \right). \quad (24)$$

对应的纵向分布可表示为

$$N(z) = \frac{N_d}{\sqrt{2\pi} (R_1^2 \sin^2 \alpha + \Delta R_p^2 \cos^2 \alpha)^{1/2}} \cdot \exp \left\{ -\frac{(z - R_p \cos \alpha)^2}{2 (R_1^2 \sin^2 \alpha + \Delta R_p^2 \cos^2 \alpha)} \right\}. \quad (25)$$

由(24)式知,若有 N_k 个离子斜入射,能进入试样的离子数只相当于 N'_k 个垂直入射的离子。

$$N'_k = N_k \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{R_p \cos \alpha}{\sqrt{2} (R_1^2 \sin^2 \alpha + \Delta R_p^2 \cos^2 \alpha)^{1/2}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{R_p}{\sqrt{2} \Delta R_p} \right) \right] \right\}. \quad (26)$$

由(25)式可见,斜入射时投影射程缩短一个 $\cos \alpha$ 因子,投影射程的标准偏差由 ΔR_p 变为 σ

$$\sigma = (R_1^2 \sin^2 \alpha + \Delta R_p^2 \cos^2 \alpha)^{1/2}. \quad (27)$$

以上考虑的是高斯分布,只用到一阶和二阶矩,若考虑更高阶矩,可构造不对称的统计分布。射程分布的三阶矩 $\langle r_p^3 \rangle$ 可由几率密度的三阶矩求得

$$\langle r_p^3 \rangle = \frac{3M_1^3 + 2M_3}{5}. \quad (28)$$

射程分布的不对称度 SK 可表示为

$$SK = \frac{\langle r_p^3 \rangle - 3R_p \cos \alpha \sigma^2 - (R_p \cos \alpha)^3}{\sigma^3}. \quad (29)$$

假定 Gibbons 等人^[21]给出的四阶中心矩比 KT 与 SK 的关系仍成立,即

$$KT = 2 \cdot 8 + 2 \cdot 4(SK)^2. \quad (30)$$

有了一至四阶矩,则可用其构造不对称的统计分布,例如 Pearson IV 分布。先讨论垂直入射的情况,这时代替(16)式的为

$$N(x, y, z) = \frac{N_d}{(\sqrt{2\pi})^2 R_1 \Delta R_p} \exp \left[-\frac{x^2 + y^2}{2 R_1^2} \right] \cdot f(\xi), \quad (31)$$

其中 $\xi = z - R_p$ 。在横向均匀的条件下,只需考虑深度分布,那么显然有

$$N(x) = \frac{N_d}{\Delta R_p} f(\xi), \quad (32)$$

其中 $f(\xi)$ 为 Pearson IV 分布函数。按照文献[24]和[25]的定义, $f(\xi)$ 为如下的微分方程的解:

$$\frac{df(\xi)}{d\xi} = \frac{(\xi - a)f(\xi)}{b_0 + b_1\xi + b_2\xi^2}, \quad (33)$$

其中

$$a = b_1 = -SK \cdot \Delta R_p (KT + 3) / A, \quad (34)$$

$$b_1 = -[2KT - 3(SK)^2 - 6] / A, \quad (35)$$

$$b_0 = -(\Delta R_p)^2 [4KT - 3(SK)^2] / A, \quad (36)$$

$$A = 10KT - 12(SK)^2 - 18. \quad (37)$$

方程(33)有如下的解:

当 $b_1^2 - 4b_0b_2 < 0$ 时有

$$\begin{aligned} \ln f(\xi) = & \frac{1}{2b_2} \ln |b_0 + b_1\xi + b_2\xi^2| \\ & - \frac{b_1/b_2 + 2b_1}{(4b_0b_2 - b_1^2)^{1/2}} \arctan \left\{ \frac{2b_2\xi + b_1}{(4b_0b_2 - b_1^2)^{1/2}} \right\}. \end{aligned} \quad (38)$$

当 $b_1^2 - 4b_0b_2 > 0$ 时有

$$\begin{aligned} \ln f(\xi) = & \frac{1}{2b_2} \ln |b_0 + b_1\xi + b_2\xi^2| \\ & - \frac{b_1/b_2 + 2b_1}{2(b_1^2 - 4b_0b_2)^{1/2}} \ln \left| \frac{2b_2\xi + b_1 - (b_1^2 - 4b_0b_2)^{1/2}}{2b_2\xi + b_1 + (b_1^2 - 4b_0b_2)^{1/2}} \right|. \end{aligned} \quad (39)$$

当 $b_1^2 - 4b_0b_2 = 0$ 时有

$$\ln f(\xi) = \frac{1}{2b_2} \ln |b_0 + b_1\xi + b_2\xi^2| + \frac{b_1/b_2 + 2b_1}{2b_2\xi + b_1}. \quad (40)$$

由(33)–(40)式所定义的 Pearson 分布函数是人们常采用的描写不对称的离子射程分布的形式^[24,25]。然而值得指出的是,这种形式使用不方便。既然按照(33)–(40)式的定义, $b_0 + b_1\xi + b_2\xi^2$ 是有量纲的,那么 $\ln |b_0 + b_1\xi + b_2\xi^2|$ 一项的数值与采用的长度单位有关系,归一化前的 $f(\xi)$ 往往过大或过小,造成计算溢出。为了解决这一问题,做如下处理:采用无量纲的变数 $\zeta = \frac{x - R_p}{\Delta R_p}$ 来进行描述,那么(33)式变为

$$\frac{df(\zeta)}{d\zeta} = \frac{(\zeta - a/\Delta R_p)f(\zeta)}{b_0/\Delta R_p^2 + b_1/\Delta R_p\zeta + b_2\zeta^2}, \quad (41)$$

显然只要定义

$$a' = b_1 = b_1/\Delta R_p = -SK(KT + 3)/A, \quad (42)$$

$$b_0' = b_0/\Delta R_p^2 = -[4KT - 3(SK)^2]/A, \quad (43)$$

$$b_2' = b_2 = -[2KT - 3(SK)^2 - 6]/A, \quad (44)$$

那么方程(41)解与方程(33)的解的形式完全一样。

即当 $b_1'^2 - 4b_0'b_2' < 0$ 时有

$$\ln f(\zeta) = \frac{1}{2b_2'} \ln |b_0' + b_1'\zeta + b_2'\zeta^2| - \frac{b_1'/b_2' + 2b_1'}{(4b_2'b_0' - b_1'^2)^{1/2}} \arctan \left\{ \frac{2b_2'\zeta + b_1'}{(4b_2'b_0' - b_1'^2)^{1/2}} \right\}. \quad (45)$$

当 $b_1'^2 - 4b_2'b_0' > 0$ 时有

$$\ln f(\zeta) = \frac{1}{2b_2'} \ln |b_0' + b_1'\zeta + b_2'\zeta^2| - \frac{b_1'/b_2' + 2b_1'}{2(b_1'^2 - 4b_2'b_0')^{1/2}} \ln \left| \frac{2b_2'\zeta + b_1' - (b_1' - 4b_2'b_0')^{1/2}}{2b_2'\zeta + b_1' + (b_1' - 4b_2'b_0')^{1/2}} \right|. \quad (46)$$

当 $b_1'^2 - 4b_2'b_0' = 0$ 时有

$$\ln f(\zeta) = \frac{1}{2b_2'} \ln |b_0' + b_1'\zeta + b_2'\zeta^2| + \frac{b_1'/b_2' + 2b_1'}{2b_2'\zeta + b_1'}. \quad (47)$$

归一化条件为

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\zeta) d\zeta = 1. \quad (48)$$

(41)–(48) 式给出的 Pearson 的形式才可以方便地计算注入离子的分布, 而文献 [24] 和 [25] 给出的形式是不方便的. 关于 Pearson IV 的选取问题将在别处讨论.

现在我们考虑斜入射情况, 将 (42)–(48) 式代入 (32) 式, 并做如下的替代, 就可得到斜入射条件下的不对称的射程分布为

$$R_p \rightarrow R_p \cos \alpha,$$

$$\Delta R_p \rightarrow \sigma = (R_{\perp}^2 \sin^2 \alpha + \Delta R_p^2 \cos^2 \alpha)^{1/2}.$$

既然 Monte Carlo 模拟给出了各层界面处每个出射离子的能量 E_k 和其出射角 α_k , 设这个离子在下一层介质中的射程参数分别为 $(R_p)_k$, $(\Delta R_p)_k$, $(SK)_k$, $(KT)_k$, 那么可以用前面描写的斜角入射的射程分布的构造方法给出在下一层介质中的注入离子的深度分布. 将各个出射离子的分布迭加, 得到总的分布. 这样逐层地给出离子在多层介质中的深度分布. 归一化的深度分布可表达如下: 设 R_p , ΔR_p , SK 和 KT 表示能量为 E_0 的离子在第一层介质中的射程分布参数, 在第一层介质中峰值归一的 Pearson IV 分布为

$$f_1 = f \left(\frac{z - R_p}{\Delta R_p}, \Delta R_p, SK, KT, E_0 \right),$$

N_0 为 Monte Carlo 模拟的离子个数, $\sigma_k = \{(R_{\perp})_k^2 \sin^2 \alpha_k + (\Delta R_p)_k^2 \cos^2 \alpha_k\}^{1/2}$, 那么注入离子的深度分布可写为

$$N(z) = f \left(\frac{z - R_p}{\Delta R_p}, \Delta R_p, SK, KT, E_0 \right) = f_1 \quad 0 \leq z < D_1, \quad (49)$$

$$N(z) = f_1 \cdot \delta(z - D_1) + \sum_k \frac{A_2 (\Delta R_p)_k}{N_0 \Delta R_p} \cdot f \left[\frac{z - D_1 - (R_p)_k \cos \alpha_k}{\sigma_k}, \sigma_k, (SK)_k, (KT)_k, E_k \right] \quad D_1 \leq z < D_1 + D_2, \quad (50)$$

其中

$$f_2 = \sum_k \frac{A_2 (\Delta R_p)_k}{N_0 \Delta R_p} \cdot f \left[\frac{z - D_1 - (R_p)_k \cos \alpha_k}{\sigma_k}, \sigma_k, (SK)_k, (KT)_k, E_k \right]$$

为第二层介质中的注入离子分布,对 k 的求和是对所有从第一层介质中出射的离子求和,

而函数 $f \left[\frac{z - D_1 - (R_p)_k \cos \alpha_k}{\sigma_k}, \sigma_k, (SK)_k, (KT)_k, E_k \right]$ 表示峰值为 1 的 Pearson IV

分布函数, A_2 为标准化系数,它使 f_2 分布的面积与停留在第二层介质中的离子数相一致,而面积的大小要乘以(26)式,即考虑界面处反射效应。(49)和(50)式中的 D_1, D_2 分别表示第一层和第二层介质的厚度。照此法可以写出第三层介质中的深度分布

$$N(z) = f_2 \cdot \delta[z - (D_1 + D_2)] + f_3 \quad D_1 + D_2 \leq z < D_1 + D_2 + D_3, \quad (51)$$

$$f_3 = \sum_l \frac{A_3 (\Delta R_p)_l}{N_0 \Delta R_p} f \left[\frac{z - D_1 - D_2 - (R_p)_l \cos \alpha_l}{\sigma_l}, \sigma_l, (SK)_l, (KT)_l, E_l \right], \quad (52)$$

这里对 l 的求和是对所有从第二层介质出射的离子求和,而式中其它各个量的意义与前面相同。依次地可给出下面各层介质中的离子浓度分布。这样描写的分布是以能量为 E_0 的离子垂直入射到第一层介质中,在这种介质中分布的峰浓度为 1 作为总的归一条件。

三、结果与讨论

经过上述处理,我们把 Monte Carlo 模拟与数值解 LSS 输运方程相结合,给出了多层介质中注入离子的深度分布的新计算方法。将这种方法与实验进行如下的比较。图 1

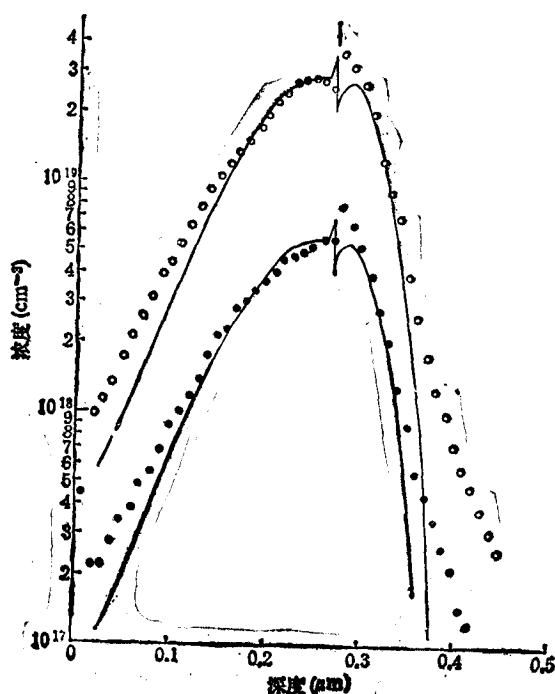


图 1 60 keV B^+ 注入 $0.27 \mu m$ SiO_2/Si 二层结构中 B 的深度分布

给出了 60 keV 的 B^+ 离子注入 Si 衬底上长有 $2700 \text{ \AA}$ SiO_2 膜双层结构中 B 的深度分布,注入剂量分别为 10^{14} cm^{-2} (实心圆) 和 $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ (空心圆)。图中实线为本文的理论计算结果,实验点为 Combasson 等人^[7]的实验结果。可见,理论能很好地描述在界面处的不连续性。在 SiO_2 和 Si 中理论与实验都符合得较好。在近表面和分布的尾部理论与实验差别较大。Combasson 的实验采用的是 SIMS 法,通常 SIMS 测量都有较长的拖尾。关于 SIMS 测量的误差问题,可以参阅 Wittmaack 的工作^[23]。考虑到实验可能存在的误差和深度分辨的限制,本文的理论与实验符合是相当好的。图 2 给出了 40 keV B^+ 注入 $600 \text{ \AA}$ $Si_3N_4/700 \text{ \AA}$ SiO_2/Si 三层结构试样中 B 的深度分布。图中实线为本文的理论计算结果,实验点也是 Combasson 等人的

SIMS 测量结果^[7]. 可见在 Si_3N_4 , SiO_2 和 Si 三种介质中理论与实验都符合得较好. 理论

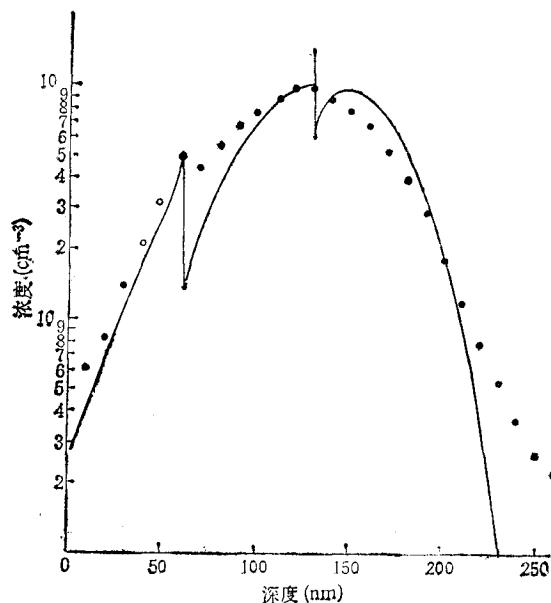


图 2 40 keV $^{11}\text{B}^+$ 注入 60 nm Si_3N_4 /70 nm SiO_2 /Si 三层结构中 B 的深度分布

曲线在界面处的不连续性比实验明显得多. 这可能是由于实验的分辨率不够造成的差别.

图 3 给出 500 keV 的 $^{209}\text{Bi}^+$ 注入 Si 上面有 920 Å ($49 \mu\text{g}/\text{cm}^2$) 的 Ge 膜双层结构中 Bi 的深度分布. 图中实线为本文的理论计算结果, 实验点为 Ishiwara 等人的 RBS 测量结果^[5,11]. 由图 3 可见理论与实验符合得较好. 图 4 表示 150 keV 的 As^+ 离子注入 200 Å Ta/ SiO_2 双层结构中 As 的浓度分布. 图中曲线为本文的理论计算结果, 台阶连线为 TRIM 程序的 Monte Carlo 模拟结果, 实验点为 Webb 等人的 RBS 测量结果^[3]. 三者的比较表明, 我们的理论与 TRIM 的模拟都能较好地描写实验结果. 而我们的计算时间比 TRIM 的计算时间约短一个数量级, 计算效率大为提高.

从图 1 到图 4 可见, 本文提出的计算方法适用于各种情况下多层介质中离子射程分布计算. 这些例子包括了较轻的离子 ($^{11}\text{B}^+$), 质量中等的离子 ($^{75}\text{As}^+$) 和较重的离子 ($^{209}\text{Bi}^+$), 包括了相邻介质层中原子质量相差不大的情况 ($\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}$), 也包括了相邻介质层中原子质量相差很大的情况 (Ta/SiO_2), 包括了单一元素的介质 (Ge/Si) 也包括了化合物介质层 ($\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2$). 这是容易理解的. 本文提出的方法是以 Monte Carlo 模拟

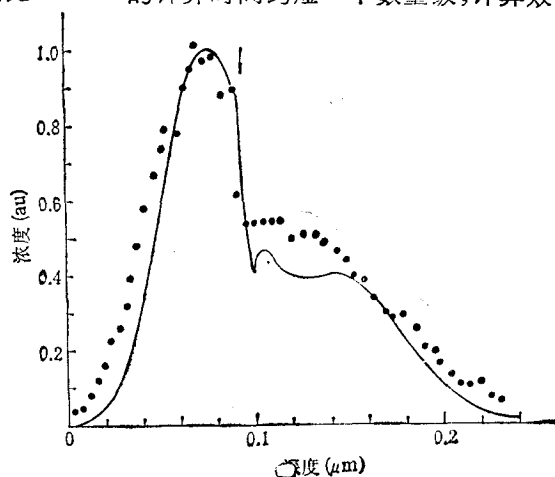


图 3 500 keV Bi^+ 注入 92 nm Ge/Si 双层结构中 Bi 的深度分布

提供的界面处的能谱和角分布为严格输入数据的计算, 所以它不同于前面提到过的各种解析近似模型, 不需要做密度变换和等效阻止等假定. 在我们给出表面反射的(24)式和(26)式中, 考虑的是对称的高斯分布, 而实际情况可能偏离高斯分布, 即出现不对称, 然而实际上各界面处出射角在 70° 以上的事件是很稀少的, 所以对所有的离子平均而言, (26)式中大括号内的因子与 1 的偏离很小, 如果用不对称的分布进行严格的数值计算, 其结果与用(26)式的结果相差仅千分之几, 所以用(26)式不会给计算带来明显的误差. 另

外一个问题是,我们没有考虑离子从界面的多次反射的问题,这是因为离子多次穿过界面的几率是非常小的,所以忽略这种事件对计算结果的影响很小.在前一层或几层的总厚度增加到一定值时,离子的平均能量降到很低时,这时在界面处的反射几率增大,多次反射也会增大,这时会对最后一层介质中的分布产生一定影响,但由于不同介质对低能离子的反射系数的差别很小^[26],即使发生了多次反射,对分布的影响也很小.关于离子的多次反射问题,我们将在别处

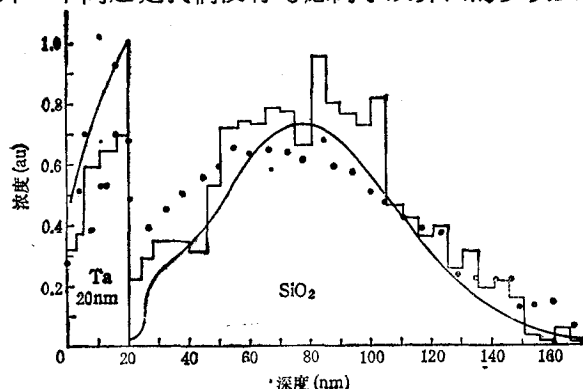


图 4 150 keV As⁺注入 SiO₂上淀积 20 nm 厚的 Ta 膜双层结构中 As 的深度分布

专门讨论. 总之,这里提出的计算方法与 TRIM 相比,精度基本相同,但计算效率却大为提高. 入射离子的能量越高,表面薄层厚度越小,则效率提高得越明显. 我们的方法能给出多层介质中注入离子的深度分布表达式,而 TRIM 程序用于多层介质则不能给出分布的表达式. 关于多层介质中离子输运的其他问题的讨论,我们将在别处给出.

- [1] D. K. Brice, *Nucl. Instr. and Meth.*, **B17**(1986), 289.
- [2] H. Ryssel, W. Krüger and J. Lorenz, *Nucl. Instr. and Meth.*, **B19/20**(1987), 40.
- [3] R. P. Webb and E. Maydell, *Nucl. Instr. and Meth.*, **B33**(1988), 117.
- [4] L. A. Christel, J. F. Gibbons and S. Mylroie, *J. Appl. Phys.*, **51**(1980), 6176.
- [5] H. Ishiwara *et al.*, *Ion Implantation in Semiconductors*, ed. S. Namba, Plenum Press, New York, (1975), p. 423.
- [6] H. Ishiwara and W. D. Mackintosh, *J. Appl. Phys.*, **51**(1980), 4729.
- [7] J. L. Combasson *et al.*, *Ion Implantation in Semiconductors and Other Materials*, ed. B. L. Crowder, Plenum Press, New York, (1972), p. 285.
- [8] D. Fink *et al.*, *Nucl. Instr. and Meth.*, **B15**(1986), 71.
- [9] J. P. Biersack and L. G. Haggmark, *Nucl. Instr. and Meth.*, **174**(1980), 257.
- [10] D. G. Ashworth, M. Moulavi-Kakhki and K. V. Anand, *J. Phys. C*, **17**(1984), 2449.
- [11] J. Lindhard, M. Scharff and H. E. Schiøtt, *Mat.-Fys. Medd. Kgl. Dan. Vid. Selsk.*, **33**(14) (1963).
- [12] J. B. Sanders, *Can. J. Phys.*, **46**(1968), 455.
- [13] J. F. Gibbons, W. S. Johnson and S. Mylroie, *Projected Range Statistics in Semiconductors and Related Materials*, 2nd ed., Dowden, Hutchinson and Ross, Inc., Stroudsburg, Pennsylvania, (1975).
- [14] K. B. Winterbon, *Ion Implantation Range and Energy Deposition Distributions*, vol. 2, IFI/Plenum Data Company, New York, (1975).
- [15] 夏田源、杨洪、谭春雨、李金华, *物理学报*, **32**(1983), 423.
- [16] J. P. Biersack and J. F. Ziegler, *Nucl. Instr. and Meth.*, **194**(1982), 93.
- [17] J. F. Ziegler, J. P. Biersack and U. Littmark, *Stopping Powers and Range of Ions in Matter*, vol. 1, ed. J. F. Ziegler, Pergamon, New York, (1985).
- [18] Xia Yue-yuan and Tan Chun-yu, *Nucl. Instr. and Meth.*, **B13**(1986), 100.
- [19] J. P. Biersack, *Nucl. Instr. and Meth.*, **B27**(1987), 21.
- [20] Luo Zhengming and Wang Shiming, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 1885.
- [21] Luo Zhengming, *Nucl. Instr. and Meth.*, **B33**(1988), 125.
- [22] J. F. Gibbons, *Ion Implantation, Handbook of Semiconductors*, vol. 3, (1980), pp. 599—640.
- [23] K. Wittmaack, *Nucl. Instr. and Meth.*, **168**(1980), 343.
- [24] W. K. Hofker, *Philips Research Reports*, (8) (1975), 1—121.
- [25] H. Ryssel, K. Habberger, K. Hoffmann, G. Prinke, R. Dümcke and A. Sachs, *IEEE, Trans. Electron Devices*,

ED-27(1980), 1484.

[26] O. S. Oen and M. T. Robinson, *Nucl. Instr. and Meth.*, **132**(1976), 647.

ION RANGE DISTRIBUTION IN MULTILAYER MATERIALS

XIA YUE-YUAN XU XIAN-GANG ZHANG ZHAO-LIN TAN CHUN-YU

Department of Physics, Shandong University, Jinan

YANG HONG SUN XIU-FANG

Department of Computer Science, Shandong University, Jinan

(Received 8 November 1988)

ABSTRACT

In this paper, we present a new method for calculation of depth profiles of implanted ions in multilayer materials. It combines the Monte Carlo simulation method with the method of numerical solution of the LSS transport equation. Taking into account the reflection of the ions at the interfaces of the layers the analytical expression of the range distribution in the multilayer materials is obtained. The comparison between the theoretical and the experimental results is made and good agreement is shown.