

# 晶格原子间非简谐相互作用对 离子注入的影响

刘 家 瑞

中国科学院物理研究所

张 建 华      李   毅

天津师范大学物理系

1988 年 11 月 2 日收到

本文用经典力学中推广的朗之万方程研究了离子注入中入射离子与固体的相互作用。在计入晶格原子间的非简谐力相互作用的情况下,得到了入射离子与靶原子之间的能量交换,靶原子对入射离子的核阻止本领和入射离子在靶中的投影射程分布,同时还讨论了入射离子激发的固体声子谱对核阻止的影响。将以上所得结果在低能范围与 TRIM 88 的计算结果进行了比较,二者符合较好。

## 一、引 言

在离子注入理论中,射程分布是一个基本而且重要的物理因素。Lindhard 等人<sup>[1]</sup>提出了无定型靶中离子注入射程分布的理论(即 LSS 理论)。已有的实验表明,在低能区,射程分布的测量数据比理论值高,对约化能量  $\epsilon$  而言,当  $0.3 \geq \epsilon \geq 0.03$  时,偏差达 30%—50%<sup>[2]</sup>。因此,仍有很多人不断地进行这方面的工作,进一步完善了理论。比较突出的是 Ziegler 和 Biersack<sup>[3]</sup>的工作,他们不断地总结实验数据,提出理论模型,并做了大量的数值计算,得到一整套计算阻止本领、射程分布的计算程序,又为指导实验工作提供了依据。但是,另一方面,由文献[4]知,在低能区,实验误差很大,实验数据可信度不高,使得该方法也受到限制。上述方法都没有考虑靶原子的结合力效应。通过对溅射产额的分析, Yamamura 等人<sup>[5]</sup>指出核阻止是固体靶的原子序数的振荡函数,这个事实说明核阻止与靶的结构有关。本文试图从理论上推导出一个不依赖于实验数据的公式,在物理过程上做一些探讨。

Shindo<sup>[6]</sup>提出了一种考虑靶原子间结合力效应的计算核阻止方法,他把固体靶的晶格振动效应作为一个简谐频谱来讨论问题。事实上,处于非零温度状态下的固体中的晶格原子,都在以自己的平衡位置为中心作简谐振动,当有人射粒子作用时,如果入射粒子的能量很大,则可将晶格原子看作是自由的。但是,当入射粒子的能量与  $kT$  的大小可比拟时( $k$  为玻尔兹曼常数,  $T$  为温度),将晶格原子间的结合力忽略是不合理的。同时,当入射离子的能量大于  $kT$  时,晶格原子将可能偏离简谐振动范围,此时,必须在晶格原子

的相互作用中加入非简谐项。本文以上述讨论为依据, 用经典力学的方法得到了入射离子与靶原子之间的能量交换, 并由此进一步求得靶原子对入射离子的核阻止本领和入射离子在靶中的投影射程分布, 同时还由入射离子对固体靶原子的作用力作傅里叶变换得到了入射离子激发的固体声子谱, 并讨论了该声子谱对核阻止的影响。将这些结果与 TRIM 88 的计算结果进行了比较, 在低能范围二者符合较好。

## 二、射程分布及核阻止

Biersack<sup>[7]</sup> 提出了一个简单的计算平均投影射程分布的近似方法 (projected range algorithm 简称为 PRAL), 在核阻止是主要的阻止过程的低能区, 投影射程分布有如下的表达式:

$$R_p = \int_0^{E_0} (E/E_0)^{-\mu/2} dE/S_n(E). \quad (1)$$

这里  $\mu = M_2/M_1$ ,  $M_1$  为入射离子的质量,  $M_2$  为靶原子的质量。

核阻止公式为

$$S_n(E) = -1/N \cdot \frac{dE}{dx} = \int_0^\infty 2\pi b W(E, b) db, \quad (2)$$

式中  $E_0$  为入射离子的能量,  $b$  为瞄准距离。  $W(E, b)$  为一个人射离子与一个靶原子相互作用时的交换能。

按照 Shindo 提出的处理方法, 能量交换为

$$W(E, b) = \int_0^T \int_0^t F[x(t)] \cos[\Phi(t) - \Phi(t')] \cdot \dot{G}(t - t') \mp [x(t')] dt' dt. \quad (3)$$

这里  $\Phi$  为入射方向与散射方向之间的夹角,  $T$  为入射离子与靶原子作用的时间。  $F[x(t)]$  为靶原子与入射离子的作用力, 在计算这个量时, Shindo 是按两体碰撞模型处理的, 没有考虑结合力效应。

$$G(t) = \frac{1}{M_2} \int_0^\infty \rho(\omega) \sin(\omega t) / \omega \cdot d\omega$$

称为响应函数,  $\rho(\omega)$  为固体态密度。

我们在上述理论的基础上, 具体地考虑靶原子之间的包括非线性项的相互作用, 列出晶格原子受周围原子及入射离子作用的方程式。为简化问题, 假设入射离子只直接与一个靶原子发生作用, 与其它原子的作用, 只是间接地通过晶格原子之间的相互作用体现出来。

晶格原子的相互作用是一个多体问题, 其运动方程的求解非常复杂。我们在 Adelman 等人<sup>[8-12]</sup> 的理论基础上引入非简谐项并作了近似处理。

将所讨论的粒子分为三类: R, P, Q。这里 R 类原子代表入射离子, P 类原子为与 R 发生直接相互作用的某一晶格原子及其少数的近邻原子, Q 类原子为除 P 类原子以外的其他晶格原子。在不考虑入射离子作用的情况下, P 类原子的运动方程为

$$\ddot{x}_P(t) = -\omega_{pP}^2 x_P(t) + \int_0^t \theta(t-\tau) x_P(\tau) d\tau + f(t), \quad (4)$$

这里  $\omega_{pP}^2$  为描述原子间相互作用的量,具体定义由参考文献[8]给出.

$$\theta(t) = \int_0^\infty \rho(\omega) \sin(\omega t) / (\omega |\mathcal{K}(i\omega)|^2) d\omega, \quad (5)$$

$$|\mathcal{K}(i\omega)|^2 = 9\omega_D^{-6} \left\{ [\omega_D - \omega \operatorname{arccoth}(\omega^{-1}\omega_D)]^2 + \frac{1}{2} (\pi\omega)^2 \right\},$$

$$f(t) = \omega_{\max} / (\pi m_P) \sum_{i=1}^N W_i |f(\omega_i)| \cos[\omega_i t - \delta(\omega_i)], \quad (6)$$

$f(\omega_i)$  为某一初始条件决定的随机力的频谱表示形式,其几率分布函数为高斯型.  $\delta(\omega)$  在  $[0, 2\pi]$  区间内均匀分布,  $W_i$  及  $x_i = \omega_i / \omega_{\max}$  为高斯-勒让德权重和点.

当有入射离子时,由于仅 P 类原子被撞击,我们所引入的非简谐项(以  $\nu Z_i^2(t)$  的形式给出)与入射离子的作用项  $\partial V(x_P - y) / \partial x_P$  均不包括  $x_q$ , 故可直接写出

$$\begin{aligned} \ddot{x}_P(t) = & -\omega_{pP}^2 x_P(t) + \int_0^t \theta(t-\tau) x_P(\tau) d\tau + f(t) \\ & - \nu Z_i^2(t) - \frac{1}{m_P} \partial V(x_P - y) / \partial x_P. \end{aligned} \quad (7)$$

入射离子的运动方程为

$$M \ddot{y}(t) = \partial V(y - x_P) / \partial y. \quad (8)$$

在计算时,假设粒子相互作用势为 Moliere 势<sup>[13]</sup>,

$$V(r) = Z_1 Z_2 e^2 / (4\pi\epsilon r) \cdot \sum_{i=1}^4 c_i e^{-b_i r/a}, \quad (9)$$

式中  $a = 0.885 a_0 / (z_1^{1/2} + z_2^{1/2})^{2/3}$ ,  $a_0$  为玻尔半径;系数  $\{c\} = \{0.35, 0.55, 0.1\}$ ,  $\{b\} = \{0.3, 1.2, 6.0\}$ .

晶格原子之间的作用力则为  $F(r)$  的泰勒展开式,作为近似,只取到  $(\Delta r)^2$  项.

入射离子对晶格的作用力,可以看作是一系列简谐力的合成,这样,对所求得的相互作用力作傅里叶变换,可以得到晶格原子受迫振动的声子频谱,即由入射离子转移给靶原子的能量产生的热振动. 这些声子谱,反过来又作用于入射离子. 在我们的讨论中,则体现在态密度  $\rho(\omega)$  的变化上. 因而,能量交换,核阻止的结果也要发生变化.

### 三、结果与讨论

根据前面的理论,计算了某些条件下的核阻止及射程分布. 解方程(7), (8)得到入射离子与靶原子的相互作用力,进而由公式(3), (2), (1)求得能量交换,核阻止和射程分布.

图1到图3为计算的核阻止与 TRIM 88 结果的比较. TRIM 88 是 Ziegler 和 Biersack 等人在总结实验数据的基础上提出的经验程序,能够反映实验结果. 由图可知,对不同的碰撞对,所得的核阻止随能量的变化趋势是一致的. 在低能范围,我们的理论与 TRIM 88 结果基本相符,这是因为室温下,晶格振动能为  $kT = 2.6 \times 10^{-2} \text{eV}$ , 此时每个核子的能

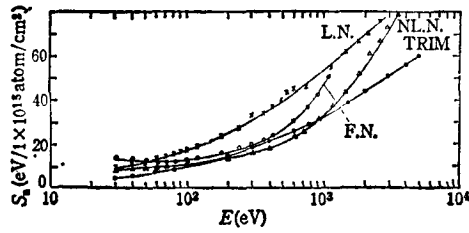


图1 Si 注入 Au 的核阻止本领 L.N. 为只考虑晶格原子间线性力情况下的计算结果, NL.N. 为加入非线性作用项的结果, F. N. 为考虑激发的声子谱影响的结果, TRIM 为 TRIM88 的计算结果

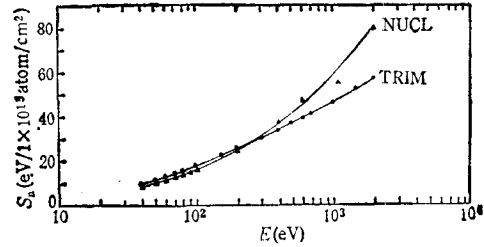


图2 Al 注入 Si 的核阻止本领 NUCL. 和 TRIM 分别为本文和 TRIM88 的计算结果

量只有  $2.6 \times 10^{-2} \text{eV}$ . 只有入射离子的能量与晶格振动的能量可以相比拟时, 我们考虑晶格振动才是有意义的. 对于不同的碰撞对作定量的分析, 则结果是有差别的. 对不同碰撞对, 由约化能量公式

$$\epsilon = 32.53 M_2 E_0 / [Z_1 Z_2 (M_1 + M_2) \times (Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})] \quad (10)$$

( $E_0$  的单位为 keV)

可得到我们的理论的适用范围的  $\epsilon$  值如下:

$$\begin{aligned} \text{Al} \rightarrow \text{Si} \quad \epsilon &\leq 0.5; \quad \text{Si} \rightarrow \text{Au} \quad \epsilon \leq 0.02; \\ \text{Au} \rightarrow \text{Si} \quad \epsilon &\leq 0.002. \end{aligned}$$

作为比较, 在图 1 中, 计算了只考虑晶格原子间线性力情况下的核阻止本领, 由图可知, 其值高于考虑非简谐效应时的值. 而在极低能和高能时, 二者接近重合, 这是因为, 在极低能情况, 非线性效应可以忽略不计, 在高能情况, 模型失效, 考虑晶格振动没有意义. 也计算了加入激发的声子谱以后的核阻止. 由图 1 可知, 在低能范围结果与 TRIM 88 的结果符合较好, 该范围正好是前面讨论的只考虑线性力和加入非线性力时偏差较大的范围, 这进一步证实了在这一能量范围, 晶格原子的振动不可忽略. 另一方面, 由计算公式知, 线性结合力效应与非线性结合力效应的不同主要体现在含有  $xr$  的项上, 而加入激发的声子谱与不加的不同主要体现在  $G(t-t')$  上, 即  $\rho(\omega)$  上.  $\rho(\omega)$  中高频部分的增多, 必然使得  $G(t)$  变大, 因而能量交换增加, 核阻止变大.

在图 4—图 6 中, 利用 (1) 式计算了投影射程分布, 并对只考虑核阻止本领和考虑核阻止与电子阻止本领的情况作了比较, 电子阻止本领的值就取 TRIM 88 的计算结果. 普遍地讲, 在过去的计算中, 在入射离子的低能区, 没有考虑晶格原子的振动, 大部分的结果是射程分布的理论值低于实验值<sup>[2,14-17]</sup>. 由图 4—图 6 可看出, 我们的计算结果, 在上述的  $\epsilon$  范围内, 射程分布高于 TRIM 88 的值, 可望对不考虑晶格振动的理论作修正, 使之更接近于实验结果. 另外, 由图也可知, 在低能区, 电子阻止对射程分布所起的作用是很小的, 所以将其忽略不计是合理的.

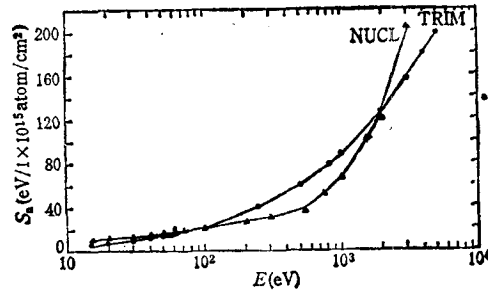


图3 Au 注入 Si 的核阻止本领 NUCL. 和 TRIM 分别为本文和 TRIM88 的计算结果

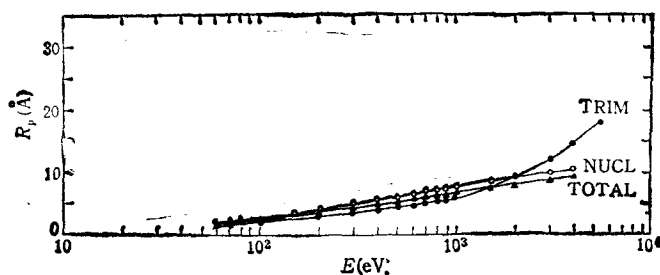


图4 Si注入Au的投影射程分布 NUCL, TOTAL和TRIM分别为本文计算中只考虑核阻止本领、考虑总的阻止本领(核阻止和电子阻止)和TRIM88的计算结果

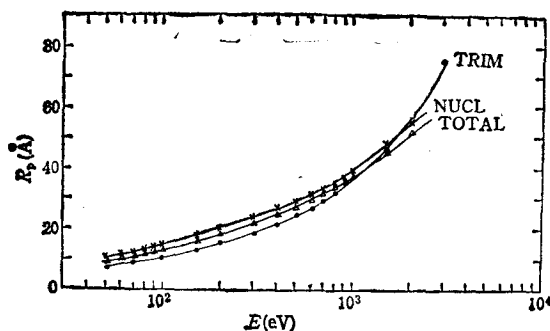


图5 Al注入Si的投影射程分布 NUCL, TOTAL和TRIM分别为本文计算中只考虑核阻止本领、考虑总的阻止本领(核阻止和电子阻止)和TRIM88的计算结果

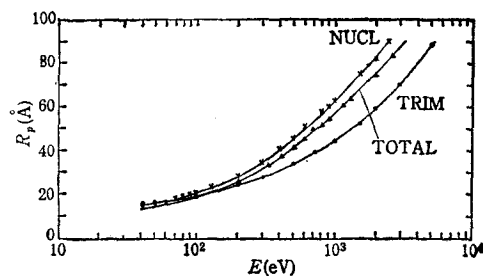


图6 Au注入Si的投影射程分布 NUCL, TOTAL和TRIM分别为本文计算中只考虑核阻止本领、考虑总的阻止本领(核阻止和电子阻止)和TRIM88的计算结果

综上所述,我们的理论只在某一特定的范围内有效,这个范围主要依赖于入射离子的每个核子的能量及固体原子的原子序数和晶格常数等量。又由于在计算过程中各个方程只能数值求解,计算量较大,使得该方法受到了限制。总之,核阻止过程是一个复杂的过程,依赖的因素很多。而且在不同的条件下,各个因素所起的作用大小也不同。因此,要想用一个统一的理论来解决这些问题是困难的。我们只作了一个方面的修正,其他范围,其他因素的进一步讨论也是重要的。

- [ 1 ] J. Lindhard, M. Scharff and H. E. Schiott, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, **33**(14) (1963).
- [ 2 ] I. L. Combasson *et al.*, *Rad. Eff.*, **36**(1978), 149.
- [ 3 ] J. P. Biersack, *et al.*, Springer Series in Electrophysics, Vol. 10: Ion Implantation Techniques. Edited by H. Ryssel and H. Glawischnig, Springer, Berlin, (1982), pp. 122—156.
- [ 4 ] J. F. Ziegler, J. P. Biersack and U. Littmark, THE STOPPING AND RANGE OF IONS IN SOLIDS Vol. 1 of The Stopping and Range of Ions in Matter, J. F. Ziegler (ED). Pergamon Press, (1985).
- [ 5 ] Y. Yamamura, N. Matsunami and N. Ito, *Rad. Eff. Lett.*, **68**(1982), 83.
- [ 6 ] S. Shindo, *Rad. Eff.*, **80**(1984), 73.
- [ 7 ] J. P. Biersack, *Nucl. Instr. & Meth.*, **182/183**(1981), 199.
- [ 8 ] S. A. Adelman and J. D. Doll, *J. Chem. Phys.*, **64**(1976), 2375.
- [ 9 ] B. J. Garrison and S. A. Adelman, *J. Chem. Phys.*, **66**(1977), 253.
- [ 10 ] A. C. Diebold, S. A. Adelman, and C. Y. Mou, *J. Chem. Phys.*, **71**(1979), 3236.
- [ 11 ] M. Shugard *et al.*, *J. Chem. Phys.*, **66**(1977), 2534.
- [ 12 ] S. A. Adelman and B. J. Garrison, *J. Chem. Phys.*, **65**(1976), 3751.
- [ 13 ] W. D. Wilson, L. G. Haggmark and J. P. Biersack, *Phys. Rev.*, **B15**(1977), 2458.

- [14] A. Feuerstein *et al.*, *Phys. Lett.*, **A51**(1975), 165.  
[15] M. Bister *et al.*, *Phys. Lett.*, **A53**(1975), 471.  
[16] H. Oetzmann *et al.*, *Phys. Lett.*, **A55**(1975), 170.  
[17] P. F. P. Fichtner *et al.*, *Rad. Eff. Lett.*, **87**(1986), 191.

## THE EFFECT OF ANHARMONIC INTERACTIONS AMONG LATTICE ATOMS ON THE ION IMPLANTATION

LIU JIA-RUI

*Institute of Physics, Academia Sinica*

ZHANG JIAN-HUA LI Yi

*Department of Physics, Tianjin Normal University*

(Received 2 November 1988)

### ABSTRACT

The interactions between incident particles and solids in ion implantation have been investigated based on the generalized Langevin equation of classical dynamics. Considering anharmonic effects of interactions among lattice atoms the energy exchange between incident particles and target atoms, the nuclear stopping power and the distributions of project ranges have been calculated numerically. The effect of the phonon spectra excited by the incident particles has been discussed also. All calculations are in good agreement with the results of the program TRIM88 in the low energy range.