

两种作用势溅射模拟结果的统计分析*

邵 其 璠

复旦大学物理二系, 上海 200433

1991 年 11 月 15 日收到

本文用基于两体碰撞近似的蒙特-卡罗模拟方法研究不同相互作用势 (Molière 势和 Universal 势) 对溅射模拟计算结果的影响, 并用 Wilcoxon 配对秩检验法给出上述结果的显著性差异。

PACC: 7920N; 5220H; 0250

一、引 言

研究固体靶中原子碰撞如背散射、溅射、辐射损伤和离子注入等问题, 描述粒子间相互作用的作用势起着十分重要的作用。这是因为经典两体碰撞散射角 $\theta(\varepsilon, b)$ 与作用势 $V(x)$ 有如下关系式^[1]:

$$\theta(\varepsilon, b) = \pi - 2b \int_R^{\infty} \frac{dx}{x \sqrt{(x^2 - b^2) - x^2 V(x)/\varepsilon}}, \quad (1)$$

这里 ε 是约化能量, b 是约化碰撞参数, R 是碰撞的最短距离, 它由下式确定:

$$R^2 - b^2 - R^2 V(R)/\varepsilon = 0. \quad (2)$$

大多数固体中原子碰撞问题遇到的是原子间距较小的相互作用势, 它们通常用如下形式表示:

$$V(r) = Z_1 Z_2 e^2 \cdot \phi(r/a)/r, \quad (3)$$

这里 $\phi(r/a)$ 是屏蔽函数, a 是屏蔽长度, Z_1 和 Z_2 分别是两碰撞粒子的原子序数。原子间相互作用势有许多种^[2,3], 最常用的是 Molière 势和 Universal 势, 它们的屏蔽函数分别是

$$\phi_M(x) = \sum_{i=1}^3 \alpha_i \exp(-\beta_i x) \quad (4)$$

及

$$\phi_U(x) = \sum_{i=1}^4 c_i \exp(-b_i x), \quad (5)$$

这里 $x = r/a$ 是约化半径, α_i , β_i , b_i 和 c_i 是有关常数。

本文介绍用蒙特-卡罗方法进行溅射模拟计算的物理模型和计算方法, 并用 Wilco-

* 国家“863”高技术项目资助的课题。

xon 配对符秩法检验上述两种作用势对不同离子入射角和入射能量所产生的溅射产额的影响,给出作用势对溅射粒子能谱、角分布和深度来源分布的显著性检验结果。

二、计算模型与检验方法

1. 计算模型

模拟粒子溅射过程的四个主要假设是:(1)移位原子在固体靶中的运动轨迹,是由一系列运动粒子与靶原子两体碰撞所产生的折线组成;(2)入射离子和反冲原子的能量损失是由与核碰撞的弹性散射能量转移和与电子的非弹性散射能量损失两部分组成;(3)对于复成分靶,电子能量损失用布拉格公式计算;(4)用解析公式近似估算不同作用势的散射角。蒙特-卡罗方法模拟粒子碰撞的主要方法包括^[4]:(1)自由程抽样;(2)碰撞参数抽样;(3)碰撞元素抽样(对复成分靶);(4)确定碰撞后粒子的运动方向。

为了缩短计算时间,本模拟程序采用两个改进措施:一是确定反冲射程上限,当反冲原子所在深度大于这个阈值时,终止跟踪这个原子^[5];二是用近似公式估算散射角。对于 Molière 势,则有

$$\theta(\varepsilon, b) = 2 \arcsin[1 + b^2 \varepsilon^{2/n} / (K_n^2 \beta_n)^{1/n}]^{-n/2}, \quad (6)$$

这里 n , K_n 和 β_n 是与 ε , b 有关的参数,文献[6]给出它们的表达式。对于 Universal 势,则有

$$\theta(\varepsilon, b) = \pi - 2 \arcsin(b/R_4) - 2b\varepsilon^{1/2} \sum_{i=1,2,3} \int_{R_i}^{R_{i+1}} dx / (x \sqrt{Q_i(x)}), \quad (7)$$

这里参数 R_i ($i = 1, 2, 3, 4$) 和函数 $Q_i(x)$ 在文献[1]中有详细描述。

2. 检验方法

本文采用 Wilcoxon 配对符秩检验的步骤是^[7]:

1) 计算每一配对数据样本之间的带有符号的差异 d_i , 并把 d_i 的绝对值从小到大排列,得到秩数 R_i ; 当 d_i 相同时,其秩取为这些同分秩的平均值。

2) 定义 T_+ 和 T_- 分别是 d_i 大于零和小于零的秩数之和,然后取检验统计量

$$T = \min(T_+, T_-).$$

3) 给定显著水平 α 及配对样本数(减去 d_i 为零的配对数目) N , 查 Wilcoxon 配对符秩检验表,得临界值 $T_{N,\alpha}$ 。

4) 如果计算得到的 T 值小于或等于 $T_{N,\alpha}$ 值,则认为在给定显著水平 α 下,两组数据有显著性差异;否则认为在该显著水平下,两者无明显差别。

三、结果与讨论

研究不同作用势溅射过程的蒙特-卡罗模拟计算程序是用 FORTRAN-77 语言编制成的。所有下述计算结果都是在 Micro VAX-II 计算机上完成的,选用的人射粒子数从 10^4 个到 1.5×10^5 个不等。

1. 入射能量与溅射产额的关系

图 1 和图 2 分别是不同入射能量 E_0 的 ${}^4\text{He}$ 离子法向 ($\theta_0 = 0^\circ$) 轰击 Cr 靶和 Fe 靶的溅射产额计算结果。表 1 是图 1 各点计算结果的数值。两图都给出用上述两种作用势模拟计算结果与实验值^[8]的比较。从图中可以看出, Universal 势的计算结果更接近实验值,这与文献[3]得出的结论是一致的。

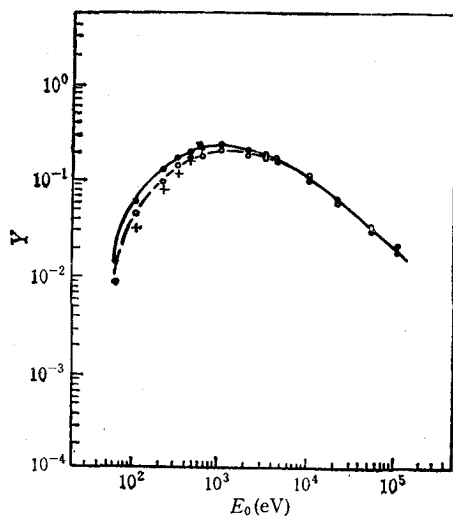


图 1 不同入射能量 E_0 的 ${}^4\text{He}$ 离子轰击 Cr 靶的溅射产额 ● 是计算值 (Molière 势); ○ 是计算值 (Universal 势); + 是实验值^[8]

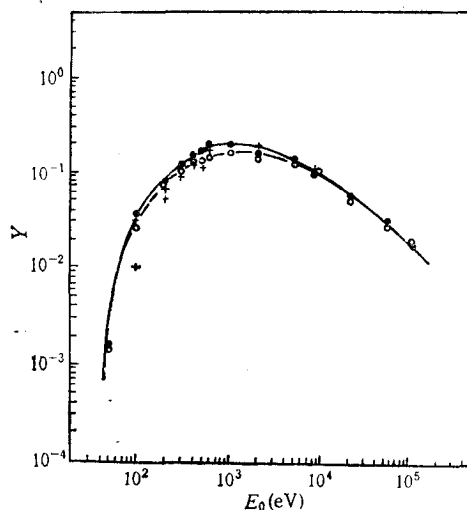


图 2 不同入射能量 E_0 的 ${}^4\text{He}$ 离子轰击 Fe 靶的溅射产额 符号说明同图 1

表 1 不同 E_0 的 ${}^4\text{He}$ 离子轰击 Cr 靶的溅射产额

$E_0(\text{keV})$	0.05	0.1	0.2	0.3	0.4	0.6	1.0
Y_{Cr}^{U}	0.0081	0.0453	0.0933	0.1276	0.1514	0.1668	0.1916
Y_{Cr}^{M}	0.0110	0.0581	0.1308	0.1618	0.1834	0.1962	0.2154
d_i	-.0029	-.0128	-.0375	-.0342	-.0320	-.0294	-.0238
R_i	-2	-9	-14	-13	-12	-11	-10
T_+							
$E_0(\text{keV})$	2.0	3.0	4.0	10	20	50	100
Y_{Cr}^{U}	0.1867	0.1765	0.1779	0.1083	0.0584	0.0331	0.0200
Y_{Cr}^{M}	0.1934	0.1805	0.1688	0.0980	0.0620	0.0277	0.0210
d_i	-.0067	-.0040	.0091	.0103	-.0036	.0054	-.0010
R_i	-6	-4	7	8	-3	5	-1
T_+			7	8	5		

表 1 是用 Wilcoxon 配对秩次法检验图 1 数据的中间结果。表 1 中 Y_{Cr}^{U} 和 Y_{Cr}^{M} 分别表示用 Universal 势和 Molière 势计算的 Cr 粒子溅射产额(以下类同)。由表 1 可知, $T = 20$ 及配对样本数为 14, 如果给定双边检验显著水平 $\alpha = 0.05$, 查 Wilcoxon 检验表, 得 $T_{14,0.05} = 21$, 由于 $T < T_{14,0.05}$, 因此在显著水平 $\alpha = 0.05$ 下, 入射能量

与溅射产额的关系与选用的作用势有明显差异。

2. 溅射能量、角分布和深度来源分布

表 2 是 1keV 能量 ^4He 离子法向轰击 Ni 靶时,用 Molière 势和 Universal 势模拟计算得到的溅射粒子能量分布。由表 2 可见,两个能谱分布在 2eV (其值约是表面结合能的一半)附近处都有最大值,并且检验统计量 $T = 13.5 < T_{18,0.05} = 40$, 因此,在显著水平 $\alpha = 0.05$ 下,作用势对溅射粒子能量分布有显著影响。

表 2 ^4He 离子轰击的溅射 Ni 粒子能谱

$E(\text{eV})$	0—1	1—2	2—3	3—4	4—5	5—6	6—7	7—8	8—9	9—10	10—20
Y_{Ni}^{U}	0.0056	0.0104	0.0135	0.0128	0.0113	0.0101	0.0097	0.0079	0.0079	0.0067	0.0038
Y_{Ni}^{M}	0.0069	0.0129	0.0149	0.0136	0.0136	0.0118	0.0112	0.0091	0.0081	0.0076	0.0043
d_i	-0.0013	-0.0025	-0.0014	-0.0008	-0.0023	-0.0017	-0.0015	-0.0012	-0.0002	-0.0009	-0.0005
R_i	-13	-18	-14	-10	-17	-16	-15	-12	-7	-11	-9
T_+											

$E(\text{eV})$	20—30	30—40	40—50	50—60	60—70	70—80	80—90	90—100
Y_{Ni}^{U}	0.0016	8.7×10^{-4}	6.3×10^{-4}	3.0×10^{-4}	2.3×10^{-4}	1.7×10^{-4}	1.0×10^{-4}	0.7×10^{-4}
Y_{Ni}^{M}	0.0019	9.0×10^{-4}	5.7×10^{-4}	3.0×10^{-4}	2.0×10^{-4}	1.3×10^{-4}	1.3×10^{-4}	1.0×10^{-4}
d_i	-0.0003	-0.3×10^{-4}	0.6×10^{-4}	0	0.3×10^{-4}	0.4×10^{-4}	-0.3×10^{-4}	-0.3×10^{-4}
R_i	-8	-2.5	6		2.5	5	-2.5	-2.5
T_+			6		2.5	5		

表 3 和表 4 分别表示 1keV 能量 ^4He 离子法向轰击不锈钢 ($\text{Fe}_{0.73}\text{Cr}_{0.18}\text{Ni}_{0.09}$) 靶,用上述两种作用势的溅射 Fe 粒子极角 β 分布和深度 D 来源分布的比较。由表 3 数据的统计分析知, $T = 11 < T_{20,0.05} = 52$, 因此,作用势对溅射 Fe 粒子极角 β 分布影响甚大 (显著水平 $\alpha = 0.05$)。同样,对表 4 溅射粒子 Fe 深度来源分布可以得出

$$T = 84.5 > T_{19,0.05} = 46,$$

因此在显著水平 $\alpha = 0.05$ 下,作用势对溅射粒子深度来源分布无显著作用,即不管采用何种作用势,溅射粒子都主要来自近表面第一、二原子层。

3. 入射角与溅射产额的关系

表 5 是上述两种作用势模拟计算 1keV 的 Ne 离子以不同入射角 θ_0 轰击 TaC 靶的部分溅射产额 Y_i 的比较。结果表明,四组数据在 θ_0 约 75° 处都有峰值;并且部分溅射产额 Y_c 比 Y_{Ta} 大得多,这是多成分靶择优溅射的结果。对表 5(a) 和 (b) 作统计分析表明,C 元素的检验统计量 $T = 0$, Ta 元素的检验统计量 $T = 9$,若取显著水平 $\alpha = 0.01$,查表可得 $T_{12,0.01} = 7$ 。由此可见,Ne 离子以不同入射角轰击 TaC 靶时,在

表 3 溅射粒子 Fe 的极角分布

$\cos\beta$	0—0.05	0.05—0.10	0.10—0.15	0.15—0.20	0.20—0.25	0.25—0.30	0.30—0.35
Y_{Fe}^U	2.670×10^{-4}	8.270×10^{-4}	1.347×10^{-3}	1.973×10^{-3}	2.420×10^{-3}	2.907×10^{-3}	3.800×10^{-3}
Y_{Fe}^M	2.330×10^{-4}	9.130×10^{-4}	1.413×10^{-3}	1.940×10^{-3}	2.447×10^{-3}	3.373×10^{-3}	3.633×10^{-3}
d_i	0.34×10^{-4}	-0.86×10^{-4}	-0.66×10^{-4}	0.33×10^{-4}	-0.27×10^{-4}	-4.66×10^{-4}	1.67×10^{-4}
R_i	3	-5	-4	2	-1	-8	6
T_+	3			2			6

$\cos\beta$	0.35—0.40	0.40—0.45	0.45—0.50	0.50—0.55	0.55—0.60	0.60—0.65	0.65—0.70
Y_{Fe}^U	4.273×10^{-3}	4.860×10^{-3}	5.220×10^{-3}	6.240×10^{-3}	6.700×10^{-3}	7.687×10^{-3}	8.193×10^{-3}
Y_{Fe}^M	4.800×10^{-3}	5.353×10^{-3}	5.973×10^{-3}	6.680×10^{-3}	7.646×10^{-3}	8.313×10^{-3}	8.826×10^{-3}
d_i	-5.27×10^{-4}	-4.93×10^{-4}	-7.53×10^{-4}	-4.40×10^{-4}	-9.46×10^{-4}	-6.26×10^{-4}	-6.33×10^{-4}
R_i	-10	-9	-15	-7	-18	-11	-12
T_+							

$\cos\beta$	0.70—0.75	0.75—0.80	0.80—0.85	0.85—0.90	0.90—0.95	0.95—1.0
Y_{Fe}^U	8.893×10^{-3}	9.440×10^{-3}	1.006×10^{-2}	1.072×10^{-2}	1.135×10^{-2}	1.234×10^{-2}
Y_{Fe}^M	9.586×10^{-3}	1.053×10^{-2}	1.081×10^{-2}	1.153×10^{-2}	1.284×10^{-2}	1.310×10^{-2}
d_i	-6.93×10^{-4}	-1.09×10^{-3}	-7.50×10^{-4}	-8.10×10^{-4}	-1.49×10^{-3}	-7.60×10^{-4}
R_i	-13	-19	-14	-17	-20	-16
T_+						

表 4 溅射粒子 Fe 的深度来源分布

$D(\text{\AA})$	0—1	1—2	2—3	3—4	4—5	5—6	6—7	7—8	8—9	9—10
Y_{Fe}^U	0.3081	0.2290	0.1543	0.1098	0.0710	0.0445	0.0292	0.0211	0.0116	0.0070
Y_{Fe}^M	0.3119	0.2245	0.1569	0.1063	0.0712	0.0457	0.0299	0.0198	0.0127	0.0073
d_i	-0.0038	0.0045	-0.0026	0.0035	-0.0002	-0.0012	-0.0007	0.0013	-0.0011	-0.0003
R_i	-18	19	-16	17	-4	-14	-11	15	-13	-6
T_+		19		17				15		

$D(\text{\AA})$	10—11	11—12	12—13	13—14	14—15	15—16	16—17	17—18	18—19	19—20
Y_{Fe}^U	0.0058	0.0032	0.0019	0.0015	0.0011	0.0002	0.0002	0.0002	0.0003	0.0001
Y_{Fe}^M	0.0051	0.0027	0.0026	0.0010	0.0010	0.0006	0.0004	0.0003	0.0001	0.0001
d_i	0.0007	0.0005	-0.0007	0.0005	0.0001	-0.0004	-0.0002	-0.0001	0.0002	0
R_i	11	8.5	-11	8.5	1.5	-7	-4	-1.5	4	
T_+	11	8.5		8.5	1.5				4	

显著水平 $\alpha = 0.01$ 下,不同作用势对部分溅射产额 Y_c 有明显影响,而对 Y_{Ta} 却无显著差异。

表 5 部分散射产额与入射角

$\theta_0(^{\circ})$	0	10	20	30	40	50	60	65	70	75	80	85
Y_U^U	0.4514	0.4430	0.4803	0.5043	0.5531	0.6281	0.6716	0.7095	0.7096	0.7559	0.7055	0.6197
Y_C^M	0.5738	0.5797	0.5961	0.6421	0.6935	0.7677	0.8356	0.8900	0.9260	0.8470	0.8280	0.7480
d_i	-0.1224	-0.1367	-0.1158	-0.1378	-0.1404	-0.1396	-0.1640	-0.1805	-0.2164	-0.0911	-0.1225	-0.1283
R_i	-3	-6	-2	-7	-9	-8	-10	-11	-12	-1	-4	-5
T_+												

(a)

$\theta_0(^{\circ})$	0	10	20	30	40	50	60	65	70	75	80	85
Y_H^H	0.1593	0.1614	0.1703	0.1968	0.2248	0.2950	0.3611	0.4045	0.4197	0.4509	0.4520	0.4018
Y_H^M	0.1672	0.1748	0.1860	0.2106	0.2537	0.3048	0.3793	0.3950	0.4130	0.4490	0.4540	0.4120
d_i	-0.0079	-0.0134	-0.0157	-0.0138	-0.0289	-0.0098	-0.0182	0.0095	0.0067	0.0019	-0.0020	-0.0102
R_i	-4	-8	-10	-9	-12	-6	-11	5	3	1	-2	-7
T_+								5	3	1		

(b)

四、小 结

从以上几个计算实例讨论,可得如下初步结论:

1. 用 Universal 势计算的结果与实验值更接近,因此它是描述原子间相互作用的一种较好的解析近似。

2. Wilcoxon 配对符号秩检验结果表明:

1) 在给定显著水平下,作用势对溅射粒子能量分布、极角分布和入射能量与溅射产额的关系都有显著影响;但作用势对溅射粒子深度来源分布却无显著作用。

2) Ne 离子以不同入射角轰击 TaC 靶时,作用势对轻元素部分溅射产额 Y_0 有明显支配作用,但对重元素部分溅射产额 Y_{Ta} 却无显著影响。

- [1] J. P. Biersack *et al.*, *Rad. Eff.*, **85** (1985), 193.
- [2] 汤家骕、张祖华,离子在固体中的阻止本领射程和沟道效应,原子能出版社,(1988).
- [3] D. J. O'Connor and J. P. Biersack, *Nucl. Instr. and Meth.*, **B15** (1986), 14.
- [4] 邵其鏊、潘正葵,计算物理, **7**(1990), 205.
- [5] J. P. Biersack and W. Eckstein, *Appl. Phys.*, **A34** (1984), 73.
- [6] J. Sielanko and W. Szyszko, *Surf. Sci.*, **161** (1985), 101.
- [7] S. Siegel, *Nonparametric Statistics for the Behavioral Sciences*, McGraw-Hill Book Company, (1956).
- [8] N. Matsunami *et al.*, *Atomic Data and Nuclear Data Table*, **31** (1984), 1.

STATISTICAL ANALYSIS OF SIMULATION CALCULATION OF SPUTTERING FOR TWO INTERACTION POTENTIALS

SHAO QI-YUN

Department of Physics II, Fudan University, Shanghai, 200433

(Received 15 November 1991)

ABSTRACT

This paper presents the effects of the interaction potentials (Molière potential and Universal potential) on computer simulation results of sputtering via Monte Carlo simulation based on the binary collision approximation. By means of Wilcoxon two-sample paired sign rank test, the statistically significant difference for the above results is obtained.

PACC: 7920N; 5220H; 0250