

注入离子在无定形固体靶中投影射程分布的统计特性*

邵其鏊 潘正瑛

(复旦大学物理二系, 上海 200433)

(中国科学院上海冶金研究所离子束开放研究实验室, 上海 200050)

(1994年2月24日收到)

用基于两体碰撞近似的动态蒙特-卡罗模拟方法和 Boltzmann 输运方程近似解法, 研究注入离子在无定形固体靶中投影射程分布的统计特性. 讨论注入物理参数对表征射程统计分布的平均投影射程、分布的标准偏差、偏度和峰度等的影响. 计算结果与有关实验数据比较符合得较好.

PACC: 7920N; 6180J; 6140

1 引言

入射粒子在固体靶内射程分布可定义为该粒子最终停止在靶内某深度处的概率. 射程理论用运动粒子与靶原子碰撞过程中能量损失的输运问题来描述射程分布. 通常, 射程分布用解析输运理论^[1-3]及蒙特-卡罗模拟方法^[4]计算. 一般认为, 后者能较真实地反映粒子碰撞的物理过程, 但需耗费较长的计算时间. 上述两方法遇到的共同问题是如何合理地描述运动粒子与靶原子间的相互作用. 粒子间相互作用通常分为粒子与靶原子核间两体弹性碰撞及粒子与靶原子内电子间非弹性碰撞两部分. 由于弹性和非弹性碰撞都是随机事件, 并且, 入射粒子在固体靶中的碰撞次数和每次碰撞中损失的能量是随机量, 因此, 入射粒子在靶中的射程分布具有统计特性.

研究入射粒子在固体中的射程分布, 对离子注入技术、微电子器件研制等领域具有重要意义. 因此, 多年来不少学者从实验和理论计算方面做了大量工作; 但是, 很少有人从数理统计角度, 探讨注入参数对射程分布的影响. 本文目的是用基于两体碰撞近似的蒙特-卡罗模拟方法和 Boltzmann 输运方程近似解法, 研究入射离子在无定形固体靶中射程分布的统计特性. 通过引入统计量中心矩和空间矩的概念, 讨论注入物理参数对表征射程统计分布的平均投影射程、分布的标准偏差、偏度和峰度的影响, 并把计算结果与有关实验数据进行比较.

* 国家自然科学基金资助的课题.

2 物理模型与计算方法

2.1 射程分布的统计描述

为简化起见,注入粒子的投影射程分布可近似地用下述正态分布描述:

$$f(x) = \frac{D}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \exp[-(x - R_p)^2/(2\Delta R_p^2)], \quad (1)$$

式中 x 为沿入射方向的深度坐标; R_p 为平均投影射程; ΔR_p 为分布的标准偏差; D 为注入总剂量. 此外,投影射程分布函数 $f(x)$ 为随机变量,它可用如下 n 阶原点矩 ν_n 及中心矩 μ_n 表示:

$$\begin{aligned} \nu_n &= \int_{-\infty}^{\infty} x^n f(x) dx; \\ \mu_n &= \int_{-\infty}^{\infty} (x - \nu_1)^n f(x) dx. \end{aligned} \quad (2)$$

由此可见,若已知注入剂量 D , 一阶原点矩 ν_1 及二阶中心矩 μ_2 , 就完全确定上述正态射程分布 $f(x)$ 的形状.

大多数情况下,注入离子在无定形靶内的射程分布具有非对称性,一般可用由 Gibbons 和 Mylroie^[5] 提出的用两个标准偏差不同的正态分布,通过适当的拼接以及 Pearson IV 型分布函数^[3]来描述. 此时,为进一步表征分布的特征,例如为了说明分布的对称性、峰凸度等,还需引入三阶及四阶中心矩 μ_3 及 μ_4 , 以正态分布为标准,定义偏度 S_k 及峰度 E_k 分别为

$$S_k = \mu_3/(\mu_2)^{3/2}, \quad (3)$$

及

$$E_k = \mu_4/\mu_2^2, \quad (4)$$

其中 S_k 反映分布的倾斜特征,因而又称为斜度,向表面倾斜的分布其斜度 S_k 为正值;向衬底内部倾斜的分布其斜度 S_k 为负值;对称分布的斜度 S_k 为零. E_k 反映分布的陡峭程度,因而又称为峭度. 由此可见, $R_p, \Delta R_p, S_k$ 及 E_k 四个物理量只需用投影射程分布的前四阶矩来描述;并且,上述四个量能较完整地描述投影射程分布的形状,因此,分布的前四阶矩已包含射程分布的主要信息.

2.2 动态蒙特-卡罗模拟

用两体碰撞近似的蒙特-卡罗方法研究入射粒子在固体靶内射程分布的物理过程的主要假设是:入射离子及级联碰撞所产生的移位原子在固体靶中的运动轨迹,是由一系列准弹性原子-原子碰撞所决定的折线所组成;离子及级联原子的能量损失包括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;以及用经典力学公式近似计算相互作用散射角等.

文献[6]中,阐述了粒子能量在级联碰撞过程中的传递方式及蒙特-卡罗模拟的四个随机抽样过程. 动态模拟应考虑靶内每薄层的厚度及每种元素的数密度作相应修正,文

献[7]详细介绍上述调整方法及为缩短计算时间而采用的措施。具体计算时,只要正确记录入射粒子停留在靶内各薄层中的数目,便得到入射粒子的射程分布曲线。若把该分布曲线近似地看作正态分布,则平均投影射程 R_p 必位于正态分布曲线的最大值处。 R_p 也可用求平均值方法估算,

$$R_p = \sum_i x_i / NN, \quad (5)$$

式中 x_i 为第 i 个注入离子在靶内的深度坐标, NN 为总的注入离子数。计算表明,上述两种方法估算得到的 R_p 值十分接近。

2.3 Boltzmann 输运方程近似解法^[8-10]

考虑能量为 E , 质量为 M_1 的离子入射到无限伸展的、原子密度为 N 的无定形靶(靶原子质量为 M_2)。以入射点为原点建立球坐标,并定义射程分布函数 $F(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E)$, 它即为从原点出发,初始能量为 E , 方向为 \mathbf{n} 的入射粒子最终停止在 \mathbf{r} 处体元 $d^3\mathbf{r}$ 内的概率为 $F(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E)d^3\mathbf{r}$ 。考虑到入射粒子进入靶后,在一段足够小的距离 $\Delta\mathbf{r}$ 内有发生碰撞与不发生碰撞两种情况,得到关系式

$$\frac{F(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E) - F(\mathbf{r} - \Delta\mathbf{r}, \mathbf{n}, E)}{|\Delta\mathbf{r}|} = N \int_0^{T_m} d\sigma [F(\mathbf{r} - \Delta\mathbf{r}, \mathbf{n}', E - T) - F(\mathbf{r} - \Delta\mathbf{r}, \mathbf{n}, E)], \quad (6)$$

式中 T_m 为最大传递能量; $d\sigma$ 为微分散射截面; T 为入射粒子碰撞一次的能量传递; \mathbf{n}' 为粒子碰撞后的运动方向。由于散射是柱对称的,因此,分布函数 $F(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E)$ 仅为 $|\mathbf{r}| = r$, E 和 $\eta = \mathbf{r} \cdot \mathbf{n} / r$ 的函数,并有

$$F(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E)d^3\mathbf{r} = F(r, \eta, E)r^2 dr d\eta d\varphi, \quad (7)$$

式中 φ 为体元 $d^3\mathbf{r}$ 的方位角。把上述关系式代入(6)式,并令 $|\Delta\mathbf{r}| \rightarrow 0$, 得到

$$\eta \frac{\partial F(r, \eta, E)}{\partial r} + \frac{1 - \eta^2}{r} \frac{\partial F(r, \eta, E)}{\partial \eta} = N \int_0^{T_m} d\sigma [F(r, \eta', E - T) - F(r, \eta, E)], \quad (8)$$

式中 η' 为散射方向 \mathbf{n}' 与 \mathbf{r} 的夹角余弦。

把分布函数 $F(r, \eta, E)$ 按以 η 为变量的勒让德多项式展开

$$F(r, \eta, E) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)m_l(r, E)P_l(\eta), \quad (9)$$

代入(8)式,经整理,得到空间矩的递推公式

$$(l+1)(l-n)m_{l+1}^n(E) - l(l+n+1)m_{l-1}^n(E) = (2l+1)N \int_0^{T_m} d\sigma(E, T)[m_l^n(E-T)P_l(\xi) - m_l^n(E)], \quad (10)$$

式中 $P_l(\xi) = P_l(\cos \phi)$ 为 l 阶勒让德多项式; ϕ 为入射粒子与靶原子两体碰撞的散射角;并有空间矩定义

$$m_l^n(E) = 4\pi \int_0^{\infty} m_l(r, E)r^{n+2}dr. \quad (11)$$

假设电子碰撞过程与核碰撞过程是相互独立的, 则(10)式等号右边可写成对应的两部分贡献之和, 于是有

$$\begin{aligned} & (l+1)(l-n)m_{l+1}^{-1}(E) - l(l+n+1)m_{l-1}^{-1}(E) \\ &= (2l+1)N \left[\int_0^{T_{n,n}} d\sigma_n(E, T_n)(m_l^+(E-T_n)P_l(\xi) - m_l^+(E)) \right. \\ & \quad \left. + \int_0^{T_{e,n}} d\sigma_e(E, T_e)(m_l^+(E-T_e) - m_l^+(E)) \right], \end{aligned} \quad (12)$$

其中 $T_{n,n}$ 及 $T_{e,n}$ 分别为传递给靶反冲原子及靶电子的最大能量, $d\sigma_n$ 及 $d\sigma_e$ 分别为弹性及非弹性微分散射截面.

在小角度近似, 即 T_n 及 $T_e \ll E$ 条件下, 把上式中的 $m_l^+(E-T_n)$ 及 $m_l^+(E-T_e)$ 围绕 $m_l^+(E)$ 展开成泰勒级数; 并利用勒让德多项式 $P_l(\xi)$ 的有关性质, 可得关于空间矩 $m_l^+(E)$ 的常微分方程^[8]

$$\begin{aligned} \frac{dm_l^+(E)}{dE} + \frac{l(2l+1)}{8+4\delta(E)/(l+1)} \frac{M}{E} m_l^+(E) = -\frac{1}{NS_n(E)} \{ (l-n)m_{l+1}^{-1}(E) \\ - l(l+n+1)/(l+1)m_{l-1}^{-1}(E) \} \{ 2 + \delta(E)/(l+1) \}^{-1}, \end{aligned} \quad (13)$$

并有初始条件

$$m_l^+(E=0) = 0, \quad m_0^+(E) = 1,$$

式中 $M = M_2/M_1$ 及 $\delta(E) = (S_e(E) - S_n(E))/S_n(E)$; $S_n(E)$ 及 $S_e(E)$ 分别为核及电子阻止本领. 上述方程解的形式为

$$m_l^+(E) = e^{-F} \left[c + \int_0^E g(E') e^{F'} dE' \right], \quad (14)$$

式中 c 为常数; $g(E')$ 为(13)式等号右边部分; 并有

$$F(E) = l(2l+1)M \int_0^E \frac{dE'}{E' [8 + 4\delta(E')/(l+1)]}.$$

这样, 在文献[8]给出的近似条件下, 由(14)式得到空间矩 $m_l^+(E)$ 与注入物理参数 M_1 , M_2 及 E 等的关系. 考虑到本文(2)和(3)式以及空间矩 $m_l^+(E)$ 与中心矩 μ_k 之间的关系式^[8], 最后得到

$$R_p = m_1^+(E) = \frac{6E}{NS_n(E)(3M+8+2\delta)}, \quad (15)$$

以及

$$\begin{aligned} S_k &= \mu_3 / (\mu_2)^{3/2} \\ &= \frac{3}{5} \{ 1 - 3^{1/2} [(384 + 504\delta + 116\delta^2 + 20\delta^3) \sqrt{(M+2+\delta)(M+6+\delta)}] \\ & \quad \times [(M+8+\delta)[(M+6+2\delta)(6+2\delta) - 2\delta]^{3/2}]^{-1} \}. \end{aligned} \quad (16)$$

由此可见, 射程分布的平均投影射程及其偏度仅与人射粒子能量及靶原子/离子的质量比有关.

3 计算结果与讨论

下述所有计算都是在 $S_{min}-S_{max}$ 2 工作站计算机上完成的, 部分计算结果与文献[11]给出的用二次离子质谱仪 (SIMS) 得到的实验值进行比较。Oosterhoff 等^[11]用 500kV HVEE 离子加速器产生能量 0.1—1.5MeV 的 P 离子, 用 CAMECA IMS-3f 离子显微镜完成 SIMS 测量, 注入 Si(100) 面的 P 离子剂量为 $2 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ 。

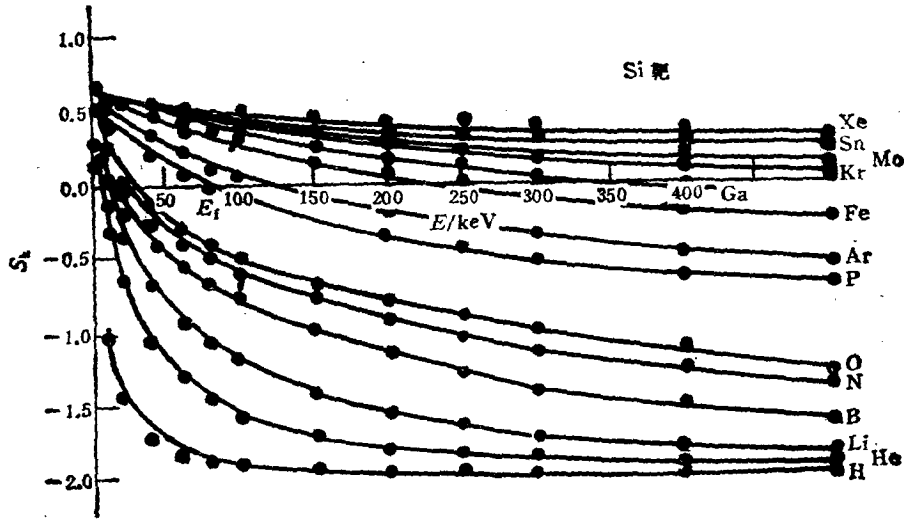


图 1 偏度 S_i 与入射能量 E 及质量比 M 的关系

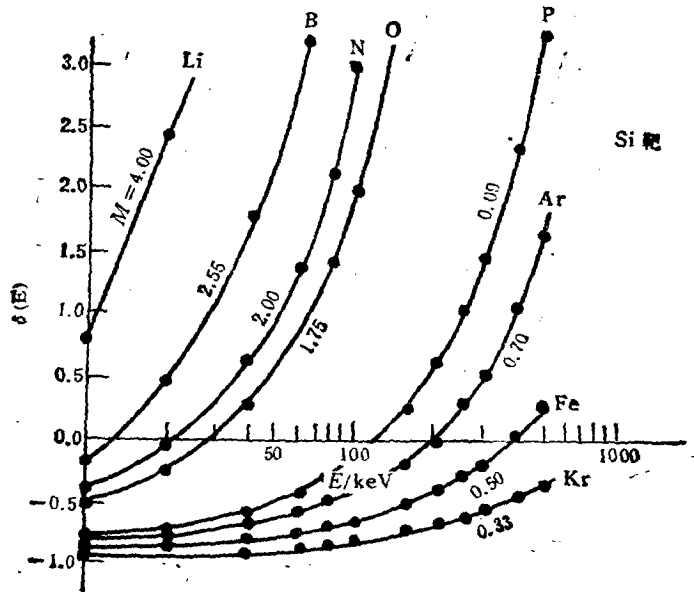


图 2 δ 值与入射能量 E 及质量比 M 的关系

3.1 投影射程分布的不对称性

投影射程分布的不对称性直接与统计分布的偏度 S_k 有关。图 1 和图 2 分别是以 Si

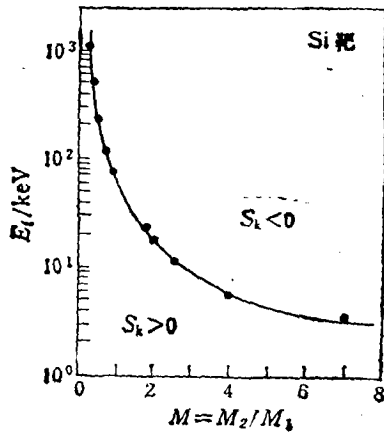


图 3 不同质量比 M 的对称分布 E_t 曲线

为衬底, 用不同入射能量 E 及入射离子种类, 由 (16) 式和 $\delta(E)$ 表达式计算得到的结果。计算中, 采用由 Biersack 和 Ziegler^[3] 给出的 $S_k(E)$ 及 $S_e(E)$ 计算公式。图 1 中, E_t 为对称射程分布 ($S_k = 0$) 对应的入射能量。由上述两图可见, 对于固定的人射离子及靶材料, 随着能量 E 的增加, S_k 由正值单调减少到负值; δ 值由负值单调上升到正值, 即电子阻止本领逐渐起支配作用。这样, 分布偏度 S_k 与粒子碰撞过程中核和电子能量损失有关, 即电子阻止本领高于核阻止本领, 导致 S_k 出现负值; 核能量损失对 S_k 有正的贡献。图 3 为不同靶原子/离子质量比 M 与对称射程

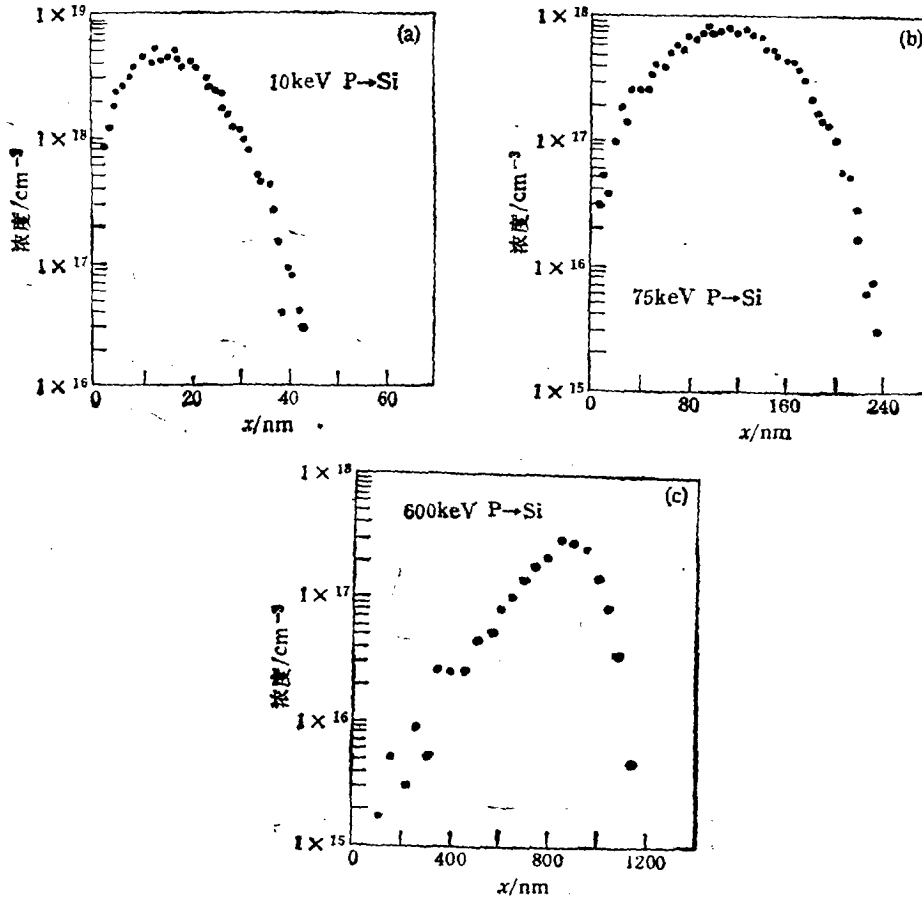


图 4 三种不同能量 P 离子注入 Si 靶的射程分布

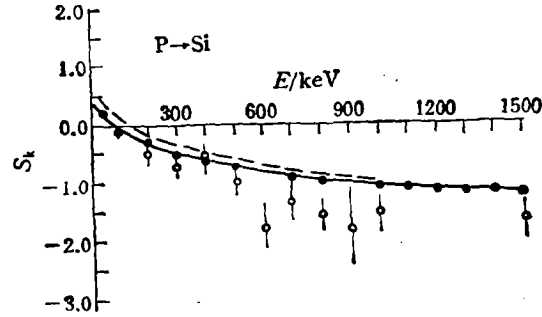


图5 偏度 S_k 与入射能量 E 的关系 实线为按(16)式计算结果;虚线为 Gibbons 等^[12]的结果;圆圈为实验值^[11]

分布所需入射能量 E_f 的关系曲线。图3表明,为获得对称射程分布,重离子注入需要更高的人射能量 E_f 。

下面用蒙特-卡罗模拟计算及有关实验数据^[11]来验证上述分析结果的正确性。图4是以三种不同能量入射的P离子轰击Si靶,用蒙特-卡罗模拟计算得到的P离子射程分布。图4表明,当入射能量 $E = 75\text{keV}$ (图4(b))时,射程分布基本上是对称的;当 $E = 10\text{keV}$ (图4(a))时,分布向表面倾斜;当 $E = 600\text{keV}$ (图4(c))时,分布向衬底倾斜;这与图1的结果是一致的。图5是不同能量P离子注入Si靶,由文献[11]SIMS法测得的偏度 S_k 与用(16)式计算结果的比较。图5表明,本计算与 Gibbons 等^[12]估计值及 SIMS 测量值都符合得较好。

3.2 其它投影射程分布参数的计算

图6为不同能量 E 的P离子注入Si靶,用(15)式计算得到的平均投影射程、蒙特-卡罗模拟结果与实验值^[11]的比较。为更接近实验值,图6中给出的是二分之一按(15)式计算的结果。图6表明,蒙特-卡罗模拟计算结果在实验值的误差范围内;而按(15)式计算的结果在低能区域内与实验值符合得较好,在高能区域内与实验数据偏差较大;这是由于小角度近似必须满足^[8]

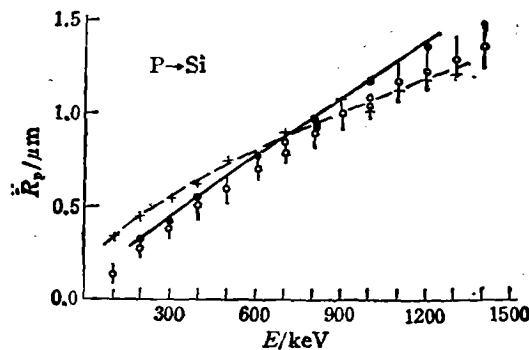


图6 平均投影射程 R_p 与入射能量 E 的关系 ○为实验值^[11]; ●为蒙特-卡罗模拟; +为按(15)式计算结果

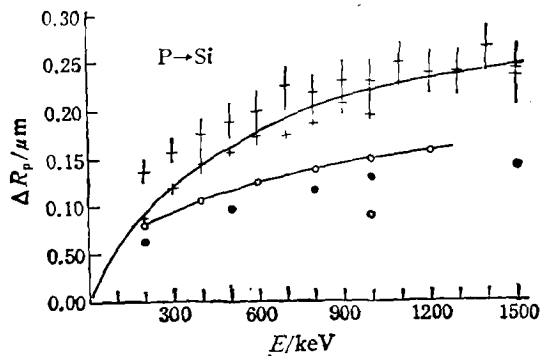


图 7 射程分布标准偏差 ΔR_p 与入射能量 E 的关系 ● 为 TRIM85 计算值；○ 为本蒙特-卡罗模拟；+ 为实验值^[11]

$$E(\text{MeV}) > 2 \times 10^4 \frac{m_e}{M_1} M_2^{-2/3},$$

式中 m_e 为电子质量。

图 7 为 P 离子注入 Si 靶条件下,用蒙特-卡罗模拟得到的射程分布标准偏差 ΔR_p 与入射能量 E 的关系。由图 7 可以看出,本蒙特-卡罗模拟与 TRIM 85 模拟计算结果较接近,它们都比实验数据^[11]小;并随入射能量 E 的增加, ΔR_p 略有上升。

用蒙特-卡罗模拟计算 600 keV 入射能量 P 离子轰击 Si 靶的射程分布注入最大浓度与离子注入剂量 D 的关系曲线如图 8 所示。由图 8 知,最大浓度与注入离子剂量 D 之间基本符合线性关系,这与(1)式的结果是一致的。此外,由本计算及文献[11]实验结果表明,在注入剂量不变情况下,注入离子入射能量对最大注入浓度的影响不大。

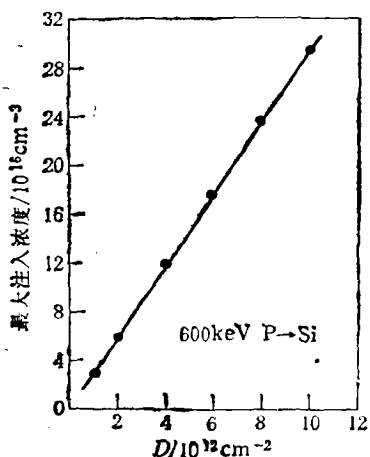


图 8 最大注入浓度与注入剂量 D 的关系

4 结 语

1. 射程分布的平均投影射程及它的偏度主要与入射粒子能量及靶原子/离子的质量比有关。偏度的正、负号主要由核能量损失与电子能量损失的相对大小决定。

2. 射程分布的标准偏差随离子入射能量的增加略有上升;射程分布的峰度(最大注入浓度)与注入剂量成正比,入射能量对它的影响可忽略。

由于本文用统计方法处理注入离子在固体靶中射程分布问题,因此,上述分析结果仅适用于无定形靶或离子沿随机方向入射晶体的情况。

- [1] D. K. Brice, *Ion Implantation Range and Energy Deposition Distributions*, Vol. 1, High Energy (Plenum Press, 1975), p. 1.
- [2] K. B. Winterbon, *Ion Implantation Range and Energy Deposition Distributions*, Vol. 2, Low Energy (Plenum Press, 1975), p. 1.
- [3] H. Ryssel and H. Glawischnig, *Ion Implantation Techniques* (Springer, Berlin, 1982), p. 157.
- [4] J. E. Robinson, K. K. Kwok and D. A. Thompson, *Nucl. Instr. and Meth.*, 132 (1976), 667.
- [5] J. F. Gibbons and S. W. Mylroie, *Appl. Phys. Lett.*, 22 (1973), 568.
- [6] 邵其望等, 物理学报, 40(1991), 1244.
- [7] 邵其望、潘正瑛, 核技术, 14(1991), 129.
- [8] M. Yu. Barabanenkov, *Nucl. Instr. and Meth.*, B82 (1993), 522.
- [9] U. Littmark and J. F. Ziegler, *Phys. Rev.*, A23 (1981), 64.
- [10] 汤家镛、张祖华, 离子在固体中的阻止本领射程和沟道效应(北京, 原子能出版社, 1988), 第182页.
- [11] S. Oosterhoff, *Nucl. Instr. and Meth.*, B30 (1988), 1.
- [12] J. F. Gibbons, W. S. Johnson and S. W. Mylroie, *Projected Range Statistics* (Academic Press, Stroudsburg, 1975).

STATISTICAL PROPERTIES OF PROJECTION RANGE DISTRIBUTIONS IN AMORPHOUS SOLIDS

SHAO QI-YUN PAN ZHENG-YING

(Department of Physics II, Fudan University, Shanghai 200433)

(Ion Beam Laboratory, Shanghai Institute of Metallurgy, Academia Sinica, Shanghai 200050)

(Received 24 February 1994)

ABSTRACT

In this paper, the statistical properties of projection range distributions in amorphous solids are investigated by using the approximate solution of the Boltzmann transport equation and the dynamic Monte Carlo simulation, which is based on the binary collision approximation. The dependences of implantation parameters on the mean projection range of energetic ions in solids, the standard deviation of the range as well as the skewness and the kurtosis of the implanted ion distribution are discussed. The calculated results are in good agreement with experiment.

PACC: 7920N; 6180J; 6140