

Cd_xHg_{1-x}Te 中离子投影射程分布矩的计算

夏曰源 杨 洪 胡燮荣 孙秀芳 高守文 谭春雨

(山东大学)

摘要——本文采用符合于 WHB 势的核散射函数计算了离子 Al⁺、P⁺、S⁺、Zn⁺、Ga⁺、As⁺、Sb⁺ 注入 Cd_xHg_{1-x}Te 衬底的投影射程分布的一次至三次矩,并由这些矩给出了投影射程的分布参数——平均投影射程 R_p 、平均投影射程的标准偏差 ΔR_p 和射程分布的歪斜度 $\sqrt{\beta_1}$ 。Al⁺ 离子的能量范围为 50 keV~1 MeV、其他离子的能量范围为 5 keV~500 keV。结果表明,本文提供的计算值在 LSS 约化能量 $s \geq 0.5$ 时与 Ryssel 等新近的计算结果符合得较好,而在低能端,我们得到的 R_p 值比他们的显著地大。本文也简要地讨论了利用计算得到的射程参数构造注入离子浓度分布的方法。

一、引言

近几年来,用离子注入技术在三元半导体材料 Cd_xHg_{1-x}Te 上制备 $p-n$ 结受到了重视^[1~5]。这不仅由于这种材料的带隙宽度可调,从而使其成为相当好的红外探测器材料,而且还因为用离子注入法在该材料上制备 $p-n$ 结,比扩散法等工艺有显著的优点。例如,能相当准确地控制注入的杂质数量及其深度分布;这是被加速了的掺杂离子向衬底中贯穿的非平衡过程,它在很大程度上不依赖于杂质在衬底中的热平衡过程。因此在原则上,可把任何所需要的离子品种掺入衬底材料。另外,离子注入及其退火可以在比较热扩散法低的温度下进行,从而避免使基片过热,这对于 Cd_xHg_{1-x}Te 这类冶金学上相当敏感的材料是十分重要的。

要采用离子注入技术制备 $p-n$ 结,最重要的问题之一是能预见注入杂质的深度分布。本文给出了 50 keV~1 MeV 的 Al⁺ 离子、5 keV~500 keV 的 P⁺、S⁺、Zn⁺、Ga⁺、As⁺、Sb⁺ 等七种离子注入 Cd_xHg_{1-x}Te 材料的投影射程分布的一次至三次矩,为用离子注入技术在 Cd_xHg_{1-x}Te 材料上制备 $p-n$ 结提供参考。

二、射程分布矩及其计算方法

根据 LSS 理论^[7],当离子在非晶靶中贯穿时,微分散射截面 $d\sigma(T, E)$ 可以通过对所有

独立的能量损失过程求和得到:

$$d\sigma(T, E) = \sum_i [d\sigma_n(T, E) + d\sigma_e(T, E)], \quad (1)$$

这里 $d\sigma_n$ 为第 i 种靶元素的微分核散射截面; $d\sigma_e$ 为第 i 种靶元素电子的微分截面; E 是入射离子的能量; T 是碰撞事件发生时离子传递给靶原子的能量。若以 $P(r, E, \theta)$ 表示在空间球坐标系中, 以能量 E 入射的离子最后停止在体积元 $2\pi r^2 \sin \theta dr d\theta$ 内的几率密度, 那么对三元靶系统, 基本 ISS 方程可写为^[8, 9]

$$\begin{aligned} \cos \theta \frac{\partial P(r, E, \theta)}{\partial r} + \frac{1 - \cos^2 \theta}{r} \frac{\partial P(r, E, \theta)}{\partial \cos \theta} \\ = \sum_i^3 N_i \int_0^{T_{m_i}} \{P(r, E - T_i, \cos \theta) - P(r, E, \theta)\} (d\sigma_n + d\sigma_e), \end{aligned} \quad (2)$$

这里 $T_{m_i} = \frac{4m_1 m_{2i}}{(m_1 + m_{2i})^2} E \equiv \gamma_i E$ 表示离子与一个第 i 种靶核碰撞可能传递给靶核的最大能量; m_1 表示入射离子的原子量; m_{2i} 表示第 i 种靶元素的原子量; θ 表示实验室散射角; N_i 表示第 i 种靶元素的原子密度。

因为几率密度 $P(r, E, \theta)$ 绕初始入射轴各方位是均匀的, 将其按 Legendre 多项式展开:

$$P(r, E, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) M_l(r, E) Y_l(\cos \theta), \quad (3)$$

这里 $M_l(r, E)$ 是展开系数; $Y_l(\cos \theta)$ 是 $\cos \theta$ 的 l 阶 Legendre 多项式。利用式(2)、(3), 并注意 Legendre 多项式的递推关系, 使等式两边同阶 Legendre 多项式的系数相等, 则有

$$\begin{aligned} (l+1) \frac{\partial M_{l+1}}{\partial r} + l \frac{\partial M_{l-1}}{\partial r} + (l+1)(l+2) \frac{M_{l+1}}{r} - l(l-1) \frac{M_{l-1}}{r} \\ = \sum_i^3 N_i (2l+1) \int_0^{r_i E} d\sigma_n \left\{ M_l(r, E - T_i) Y_l \left(\sqrt{1 - T_i/E} + \frac{1 - \mu_i}{2} \frac{T_i/E}{\sqrt{1 - T_i/E}} \right) \right. \\ \left. - M_l(r, E) \right\} + \sum_i^3 N_i (2l+1) \int_0^{r_i E} d\sigma_e \{M_l(r, E - T_i) - M_l(r, E)\}, \end{aligned} \quad (4)$$

这里 $\mu_i = \frac{m_{2i}}{m_1}$ 。

定义 n 次矩如下^[8]:

$$M_l^n(E) = 4\pi \int_0^{\infty} M_l(r, E) r^{n+2} dr, \quad (5)$$

由式(4)、(5)可得到 $P(r, E, \theta)$ 的矩的基本递推关系:

$$\begin{aligned} (l+1)(l-n) M_{l+1}^{n-1} - l(l+n+1) M_{l-1}^{n-1} \\ = (2l+1) \sum_i^3 N_i \int_0^{r_i E} d\sigma_n \left\{ M_l^n(E - T_i) Y_l \left(\sqrt{1 - T_i/E} + \frac{1 - \mu_i}{2} \frac{T_i/E}{\sqrt{1 - T_i/E}} \right) \right. \\ \left. - M_l^n(E) \right\} + (2l+1) \sum_i^3 N_i \int_0^{r_i E} \{M_l^n(E - T_i) - M_l^n(E)\} d\sigma_e, \end{aligned} \quad (6)$$

这里 $l+n$ 是偶数, 而且 $l \leq n$ 。

投影射程分布的 n 次矩定义如下:

$$\langle r_p^n \rangle = \iint (r \cos \theta)^n P(r, E, \cos \theta) 2\pi r^2 \sin \theta d\theta dr, \quad (7)$$

矩 $\langle r_p^n \rangle$ 与 M_l^n 之间的关系为

$$\langle r_p \rangle = M_1^1(E), \quad (8a)$$

$$\langle r_p^2 \rangle = \frac{M_0^2(E) + 2M_2^2(E)}{3}, \quad (8b)$$

$$\langle r_p^3 \rangle = \frac{3M_1^3(E) + 2M_3^3(E)}{5}, \quad (8c)$$

$$\langle r_p^4 \rangle = \frac{7M_0^4(E) + 20M_2^4(E) + 8M_4^4(E)}{35}, \quad (8d)$$

.....

平均投影射程 R_p 、平均投影射程的标准偏差 ΔR_p 、射程分布的歪斜率 $\sqrt{\beta_1}$ 为

$$R_p = \langle r_p \rangle, \quad (9)$$

$$\langle \Delta R_p \rangle^2 = \langle r_p^2 \rangle - \langle r_p \rangle^2, \quad (10)$$

$$\sqrt{\beta_1} = \frac{\langle r_p^3 \rangle - 3R_p \langle \Delta R_p \rangle^2 - R_p^3}{\Delta R_p^3}. \quad (11)$$

由式(8a—d), (9), (10), (11)得知, 只要计算出矩 M_l^n , 就能得到投影射程分布参数, 从而可给出射程分布。我们这里给出一至三次矩, 则 $n=1, 2, 3, l=0, 1, 2, 3$ 且 $n+l$ 为偶数, 那么由式(6)可给出五个积分方程, 其一般形式为

$$g_l^n(E) = - \sum_i^3 N_i \int_0^{\gamma_i E} \left\{ M_l^n(E - T_i) Y_l \left(\sqrt{1 - T_i/E} + \frac{1 - \mu_i}{2} \frac{T_i/E}{\sqrt{1 - T_i/E}} \right) - M_l^n(E) \right\} d\sigma_n + \sum_i^3 N_i S_{ei}(E) \frac{dM_l^n}{dE}, \quad (12)$$

这里 S_{ei} 是第 i 种靶原子对应的电子阻止本领。由式(6)得到:

$$g_0^1(E) = 1, \quad g_0^2(E) = 2M_1^1(E), \quad g_0^3(E) = 2M_1^1(E), \\ g_1^2(E) = \frac{1}{3} [4M_2^2(E) + 5M_0^2(E)], \quad g_1^3(E) = 3M_2^2(E).$$

将 M_l^n 按 Taylor 级数展开成 T_i 的幂级数, 那么式(12)化为

$$g_l^n(E) = M_l^n \cdot B_{n,l,0} + \frac{dM_l^n}{dE} \cdot B_{n,l,1} - \frac{1}{2!} \frac{d^2 M_l^n}{dE^2} \cdot B_{n,l,2} + \frac{1}{3!} \frac{d^3 M_l^n}{dE^3} \cdot B_{n,l,3} + \dots, \quad (13)$$

这里

$$B_{n,l,0} = \sum_i^3 N_i \int_0^{\gamma_i E} \left\{ 1 - Y_l \left(\sqrt{1 - T_i/E} + \frac{1 - \mu_i}{2} \frac{T_i/E}{\sqrt{1 - T_i/E}} \right) \right\} d\sigma_n, \quad (14)$$

$$B_{n,l,k} = \sum_i^3 N_i \int_0^{\gamma_i E} T_i^k Y_l \left(\sqrt{1 - T_i/E} + \frac{1 - \mu_i}{2} \frac{T_i/E}{\sqrt{1 - T_i/E}} \right) d\sigma_n, \quad (15)$$

$$B_{n,l,1}^* = B_{n,l,1} + \sum_i^3 N_i S_{ei}(E). \quad (16)$$

所有的 B 系数可由数值积分给出, 那么解方程(13)可以求出各次矩 M_l^n 的近似值。为此我们采用类似于 Gibbons^[9]等的计算原则, 把 M_l^n 表示成一个级数形式:

$$M_l^n = M_{l,0}^n + \sum_j M_{l,j}^n, \quad (17)$$

为了计算 $M_{l,0}^n$, 先忽略方程(13)中的高次导数, 得到一个一阶微分方程:

$$\frac{dM_{l,0}^n}{dE} = \frac{g_l^n(E) - M_{l,0}^n \cdot B_{n,l,0}}{B_{n,l,1}^*}, \quad (18)$$

数值解方程(18)求得 $M_{l,0}^n$, 然后用 $\frac{d^2 M_{l,0}^n}{dE^2}$ 作为 $\frac{d^2 M_l^n}{dE^2}$ 的近似值, 并忽略三次以上的导数, 则可得到一次修正项 $M_{l,1}^n$ 的一阶微分方程:

$$\frac{dM_{i,1}^n}{dE} = \frac{\frac{1}{2!} B_{n,l,2} \frac{d^2 M_{i,0}^n}{dE^2} - B_{n,l,0} M_{i,1}^n}{B_{n,l,1}^*}, \quad (19)$$

数值解方程(19)求得 $M_{i,1}^n$, 那么二次修正项 $M_{i,2}^n$ 可由如下的一阶方程求出:

$$\frac{dM_{i,2}^n}{dE} = \frac{\frac{1}{2!} \frac{d^2 M_{i,1}^n}{dE^2} B_{n,l,2} - \frac{1}{3!} \frac{d^3 M_{i,0}^n}{dE^3} B_{n,l,3} - B_{n,l,0} M_{i,2}^n}{B_{n,l,1}^*}, \quad (20)$$

按照如此逐步逼近的方式, 原则上可以得到任何高次修正项。然而正如 Gibbons 等指出的那样, 要将修正项级数的截尾误差与高次修正项的数值误差进行折衷考虑, 保留到二次修正项是最好的折衷^[9]。对于 $n=1, 2, 3, l=0, 1, 2, 3$ 的可能组合, 只要解式(18), (19), (20)求得一次至三次矩。为了方便, 采用 LSS 无量纲参数进行计算。LSS 无量纲约化射程和能量参数分别为

$$\rho = N\pi a^2 \gamma R \equiv O_\rho R, \quad (21a)$$

$$\varepsilon = \frac{am_2 E}{Z_1 Z_2 e^2 (m_1 + m_2)} \equiv O_\varepsilon E, \quad (21b)$$

这里 $a = 0.8853(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/3} a_0 = 0.8853 Z^{-1/3} a_0$ 称屏蔽参数; $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$ 为玻尔半径; N 为靶材料的原子密度(加脚标 i 则表示第 i 种靶元素); Z_1 为入射离子的原子序数; Z_2 为靶原子的原子序数(加脚标 i 表示第 i 种靶原子), e 为单位电荷值。

LSS 普适核散射截面 $d\sigma_n$ 可写为

$$d\sigma_n = \frac{\pi a^2}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) dt, \quad (22)$$

这里 $t^{1/2} = \varepsilon \sin\left(\frac{\phi}{2}\right)$; ϕ 是质心系散射角; $f(t^{1/2})$ 称为核散射函数。LSS 根据 Thomas-Fermi (T-F) 势给出了弹性核碰撞事件的散射函数 $f(t^{1/2})$ 曲线图^[7], 而 Winterbon 等给出了 $f(t^{1/2})$ 的一个很好的解析近似式^[6]:

$$f(t^{1/2}) = \frac{\lambda t^{1/2-m}}{[1 + (2\lambda t^{1-m})^q]^{1/q}}, \quad (23)$$

选取参数 $\lambda = 1.309$, $m = \frac{1}{3}$, $q = \frac{2}{3}$, 这个解析表达式与 LSS 散射函数曲线拟合得非常好。

因此 Gibbons 和 Winterbon 的射程矩的计算都采用了形式为

$$f(t^{1/2}) = \frac{1.309 t^{1/6}}{[1 + (2.618 t^{2/3})^{2/3}]^{3/2}}$$

的核散射函数^[9,10]。然而新近的实验结果表明, 根据 T-F 原子相互作用势给出的核散射截面在低能时, 与实验有较大的差别^[11]。T-F 势在低能情况下给出了过大的核散射截面, 从而导致了过小的低能离子射程^[11,12]。Wilson 等给出了比 T-F 势更符合实际情况的原子相互作用势, 称为 WHB 势^[13]。Kalbitzer 等和 W. K. Chu 等调整了参数 λ , m 和 q 值, 得到了新的散射函数 $f(t^{1/2})$, 它既符合于 WHB 势又保持了 Winterbon 散射函数的解析形式, 且与新近的精确定测量符合得较好。他们给出的 λ , m , q 参数值分别为^[11,12]

$$\lambda = 2.54, \quad m = 0.25, \quad q = 0.475 \quad (\text{Kalbitzer 等});$$

$$\lambda = 2.542, \quad m = 0.25, \quad q = 0.5 \quad (\text{W. K. Chu 等}).$$

我们在计算中采用了两者的折衷, 即用了如下的核散射函数:

$$f(t^{1/2}) = \frac{2.54t^{1/4}}{[1 + (5.08t^{3/4})^{1/2}]^2} \quad (24)$$

这个散射函数与 W. K. Chu 等给出的几乎没有差别。图 1 给出了几种散射函数的比较。图 1 中 T-F 表示由 T-F 势给出的数值结果, KO 表示 Kalbitzer 等给出的散射函数, 标有 CH 的虚线表示 W. K. Chu 等给出的散射函数, 本文采用的散射函数式 (24) 与 W. K. Chu 的散射函数在图中是一致的, 无法将它们分开。由图 1 可见, 在 $t^{1/2} < 1$ 的情况下, T-F 散射函数比符合于 WHB 势的散射函数 CH 和 KO 显著地高。而在 $t^{1/2} \geq 10$ 时, 各种势给出一致的散射函数。

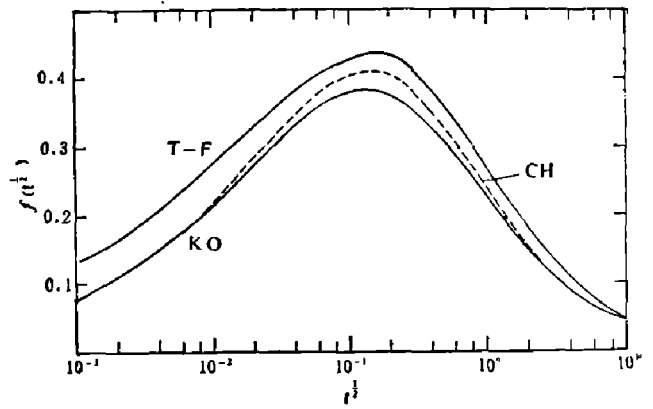


图 1 散射函数 $f(t^{1/2}) = \frac{d\sigma}{dt} \frac{2t^{3/2}}{\pi a^2}$ 与约化能量传递参数 $t^{1/2} = \varepsilon \sin \frac{\phi}{2}$ 的关系

为计算方便, 采用无量纲参数; 做变换 $\xi^2 = \frac{T}{\gamma E}$, 则核散射截面和散射函数可分别写为

$$d\sigma_n = \pi a^2 f(\varepsilon \xi) \frac{d\xi}{\varepsilon \xi^2}, \quad (25)$$

$$f(\varepsilon \xi) = \frac{2.54(\varepsilon \xi)^{1/2}}{[1 + (5.08(\varepsilon \xi)^{3/2})^{1/2}]^2}, \quad (26)$$

B 系数可化为

$$B_{1,1,0} = \sum_i^3 \frac{c_{\rho i}}{c_{\varepsilon i} E} \int_0^1 \left(\frac{1}{1 + \sqrt{1 - \gamma_i \xi^2}} - \frac{1 - \mu_i}{2} \frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_i \xi^2}} \right) f(\varepsilon_i \xi) d\xi \equiv \sum_i^3 (B_{1,1,0})_i, \quad (27a)$$

$$B_{1,1,k} = \sum_i^3 \frac{c_{\rho i} E^{k-1}}{c_{\varepsilon i}} \int_0^1 (\gamma_i \xi^2)^{k-1} \left(\sqrt{1 - \gamma_i \xi^2} + \frac{1 - \mu_i}{2} \frac{\gamma_i \xi^2}{\sqrt{1 - \gamma_i \xi^2}} \right) f(\varepsilon_i \xi) d\xi \\ \equiv \sum_i^3 (B_{1,1,k})_i, \quad (27b)$$

$$B_{2,0,0} = 0, \quad (27c)$$

$$B_{2,0,k} = \sum_i^3 \frac{c_{\rho i} E^{k-1}}{c_{\varepsilon i}} \int_0^1 (\gamma_i \xi^2)^{k-1} f(\varepsilon_i \xi) d\xi \equiv \sum_i^3 (B_{2,0,k})_i, \quad (27d)$$

$$B_{2,2,0} = \frac{3}{2} \left[\frac{\sum_i^3 \mu_i (B_{2,0,1})_i}{E} - \sum_i^3 \left(\frac{1 - \mu_i}{2} \right)^2 \frac{c_{\rho i}}{c_{\varepsilon i} E} \int_0^1 \frac{\gamma_i \xi^2 f(\varepsilon_i \xi)}{1 - \gamma_i \xi^2} d\xi \right], \quad (27e)$$

$$B_{2,2,k} = B_{2,0,k} + \frac{3}{2} \left[\frac{-\sum_i^3 \mu_i (B_{2,0,k+1})_i}{E} + \sum_i^3 \frac{c_{\rho i} E^{k-1}}{c_{\varepsilon i}} \left(\frac{1 - \mu_i}{2} \right)^2 \int_0^1 \frac{(\gamma_i \xi^2)^{k+1}}{1 - \gamma_i \xi^2} f(\varepsilon_i \xi) d\xi \right], \quad (27f)$$

$$B_{3,1,0} = B_{1,1,0}, \quad (27g)$$

$$B_{3,1,k} = B_{1,1,k}, \quad (27h)$$

$$B_{3,3,0} = B_{1,1,0} + \frac{5}{2} \left\{ \frac{\sum_i^3 \mu_i (B_{1,1,1})_i}{E} - \sum_i^3 \left(\frac{1 - \mu_i}{2} \right)^2 \frac{c_{\rho i}}{c_{\varepsilon i} E} \int_0^1 \frac{\gamma_i \xi^2}{\sqrt{1 - \gamma_i \xi^2}} \right. \\ \left. \cdot \left(1 + \frac{1 - \mu_i}{2} \cdot \frac{\gamma_i \xi^2}{1 - \gamma_i \xi^2} \right) \cdot f(\varepsilon_i \xi) d\xi \right\}, \quad (27i)$$

$$B_{3,3,k} = B_{1,1,k} + \frac{5}{2} \left\{ \frac{-\sum_i^3 \mu_i (B_{1,1,k+1})_i}{E} + \sum_i^3 \frac{c_{ei} E^{k-1}}{c_{ei}} \left(\frac{1-\mu_i}{2} \right)^2 \cdot \int_0^1 \frac{(\gamma_i \xi^2)^{k+1}}{\sqrt{1-\gamma_i \xi^2}} \left(1 + \frac{1-\mu_i}{2} \frac{\gamma_i \xi^2}{1-\gamma_i \xi^2} \right) f(\epsilon_i \xi) d\xi \right\}, \quad (27j)$$

在计算中, 电子的阻止本领采用 LSS 给出的电子阻止公式^[7]:

$$NS_e(E) = 0.0793 Z_1^{1/6} \frac{c_p}{c_e^{1/2}} \sqrt{\frac{Z_1 Z_2 (m_1 + m_2)^3}{Z m_1^3 m_2}} E^{1/2}, \quad (28)$$

$$B_{n,l,1}^* = B_{n,l,1} + \sum_i^3 0.0793 Z_1^{1/6} \frac{c_{pi}}{c_e^{1/2}} \sqrt{\frac{Z_1 Z_2 (m_1 + m_{2i})^3}{Z_i m_1^3 m_{2i}}} E^{1/2}. \quad (29)$$

式(27a)~(27j)的各 B 系数用 Simpson 法数值积分求得。方程组(18)~(20)按顺序逐一数值求解, 但需要确定各次矩及其导数的初始值。Gibbons 等在确定初值时忽略了电子的阻止本领的贡献^[9], 然而新近的实验表明^[11], 即使在 $\epsilon=0.01$ 的低能情况下, 电子阻止仍占总阻止本领的 5~10%, 所以忽略电子阻止作用来确定初值是不够合理的。我们这里初值的取法是: 取 $\epsilon_0=0.01$, 用反幂指数势, $S=3$, 取电子的阻止本领为总阻止本领的 7%, 先数值计算各 $B(E)$ 系数, 令其与 $B(E)$ 的解析解相等, 则可确定 $B(E)-E$ 关系的各系数, 从而得到各次矩 $M_i^n(E)-E$ 关系的系数, 然后代入初值 $E_0 = \frac{\epsilon_0}{c_e} = \frac{0.01}{c_e}$, 求出所需要的各次矩 M_i^n 及其导数的初值。这样确定的初值, 能更符合于真实的低能相互作用, 更准确地给出初值。对方程(18)~(20)数值积分用的是预报校正法, 步长的选取原则类似于 Gibbons 等的原则^[9]。

三、结果和讨论

5 keV 至 500 keV 的 P^+ 、 S^+ 、 Zn^+ 、 Ga^+ 、 As^+ 、 Sb^+ 离子, 50 keV 至 1 MeV 的 Al^+ 离子注入到 $Cd_{0.2}Hg_{0.8}Te(x=0.20)$ 中的平均投影射程 R_p , 平均投影射程的标准偏差 ΔR_p 和射程分布的不对称度 $\sqrt{\beta_1}$ 的理论计算结果列于表 1 中。图 2 给出用 LSS 无量纲投影射程 ρ_p 和能量参数 s 表示的低能 ρ_p-s 关系, 虚线是本文计算的 Sb^+ 注入 $Cd_{0.2}Hg_{0.8}Te$ 的 ρ_p-s 关系, 虚点线是 Ryssel^[9] 等的计算, 由图可见, 在 $s \geq 0.5$ 的情况下, 两者趋于一致, 而在 $s < 0.5$

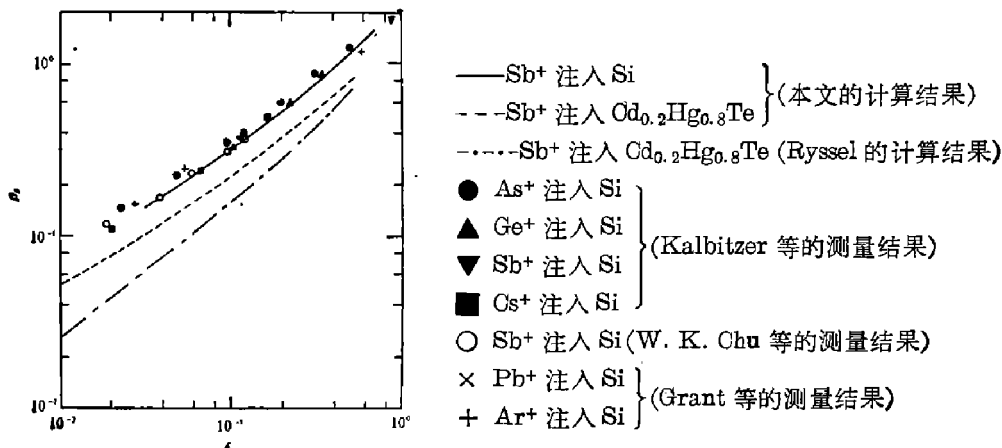


图 2 无量纲投影射程 ρ_p 与无量纲能量 s 的关系

表1 P⁺、S⁺、Zn⁺、Ga⁺、As⁺、Sb⁺和Al⁺离子注入Cd_{0.1}Hg_{0.9}Te的投影射程分布参数

(R_p, ΔR_p 的单位为 Å, x=0.2, 材料密度 ρ=7.6307 g/cm³)

离子	能量 (keV)	射程分布参数																		
		5	10	20	30	40	50	60	80	100	150	200	300	400	500	600	700	800	900	1000
P ⁺	R _p	76.6	120	198	273	347	421	496	647	800	1191	1589	2397	3205	4007					
	ΔR _p	83.2	124	190	248	302	354	403	498	588	797	988	1329	1626	1889					
	√β ₁	0.184	0.171	0.143	0.127	0.094	0.068	0.044	0	-0.041	-0.029	-0.179	-0.324	-0.430	-0.518					
S ⁺	R _p	74.3	116	190	260	330	399	469	610	753	1117	1488	2243	2994	3745					
	ΔR _p	79.9	118	181	236	287	335	381	470	554	751	981	1255	1538	1789					
	√β ₁	0.191	0.179	0.153	0.134	0.106	0.082	0.059	0.016	-0.023	-0.024	-0.159	-0.299	-0.403	-0.489					
Zn ⁺	R _p	60.3	89.6	137	180	220	259	297	372	447	633	821	1205	1596	1993					
	ΔR _p	49.0	72.3	108	138	164	190	214	259	303	405	502	683	851	1013					
	√β ₁	0.459	0.393	0.370	0.357	0.341	0.327	0.314	0.289	0.265	0.221	0.168	0.081	0.036	-0.052					
Ga ⁺	R _p	60.0	89.0	136	178	217	255	292	365	437	617	798	1167	1544	1928					
	ΔR _p	47.4	70.0	104	133	159	183	206	250	292	390	488	658	822	978					
	√β ₁	0.498	0.417	0.391	0.373	0.362	0.348	0.335	0.313	0.289	0.246	0.195	0.110	0.038	-0.026					
As ⁺	R _p	59.1	87.4	133	173	210	246	281	351	418	587	757	1096	1453	1810					
	ΔR _p	45.1	66.8	99.5	127	151	174	196	237	276	368	455	619	773	920					
	√β ₁	0.552	0.446	0.414	0.400	0.385	0.372	0.359	0.336	0.315	0.274	0.227	0.146	0.077	0.016					
Sb ⁺	R _p		78.3	117	150	179	206	231	281	328	441	551	768	985	1205					
	ΔR _p		49.0	72.7	92.2	109	125	140	167	193	253	308	412	511	606					
	√β ₁		0.585	0.579	0.550	0.530	0.517	0.505	0.487	0.472	0.445	0.414	0.360	0.313	0.270					
Al ⁺	R _p						476	563	739	918	1376	1841	2779	3711	4629	5488	6364	7221	8059	8878
	ΔR _p						542			678	915	1181	1510	1834	2116	2328	2545	2740	2917	3079
	√β ₁											0.064	-0.327	-0.473	-0.575	-0.660	-0.733	-0.798	-0.856	-0.910

的低能端,两者有显著的差别。在低能端,核阻止本领占优势,因此两者的差别不是由于采用不同的电子阻止本领造成的,而可能是采用不同的核散射势造成的。而检验计算结果可靠性的最好方法是与可靠的实验结果进行比较。Ryssel 等用 $^{10}\text{B}(n, \alpha)^7\text{Li}$ 核反应测量了 $^{10}\text{B}^+$ 注入 $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ 的射程分布^[9],然而在 $^{10}\text{B}^+$ 离子能量为 60 keV 的情况下,约化能量 ϵ 已经等于 1.35 了,这已经是我们所称的“高能”端了,这时我们的计算结果已经与 Ryssel 结果在实验误差范围内彼此符合。所以与他们的测量比较,不能真正检验低能情况下($\epsilon < 0.5$)计算的可靠性。为此用我们的程序计算了 Sb^+ 离子注入 Si 的 ϵ - ρ_p 关系,其结果用实线表示在图 2 中,同时标出了新近用高深度分辨率的 RBS 技术^[11,15]以及用 SIMS 技术测量的结果^[13],可见我们的计算结果与实验符合得很好。而 Ryssel 等的结果,可能过低地给出了低能射程。至于射程分布的标准偏差 ΔR_p ,两种计算方法彼此符合得较好。则相对歧离 $\frac{\Delta R_p}{R_p}$ 在低能端差别很大,例如 10 keV 的 Sb^+ 注入 $\text{Cd}_{0.2}\text{Hg}_{0.8}\text{Te}$, $\mu = \frac{M_2}{m_1} \approx 1.28$,按照 LSS 理论,在 $\epsilon \leq 0.1$ 时, $\frac{\Delta R_p}{R_p}$ 应为 0.63^[10]。我们计算得 $\frac{\Delta R_p}{R_p} = 0.626$,可见我们的计算是与 LSS 理论自洽的。而 Ryssel 的计算给出 $\frac{\Delta R_p}{R_p} = 0.947$,可见他们给出了过大的相对射程歧离,这可能是 R_p 过小造成的。他们没有计算三次矩,所以利用他们提供的射程分布参数,只能构造完全对称的高斯型分布。

有了射程分布参数 R_p 、 ΔR_p 和 $\sqrt{\beta_1}$ 后,可以描绘出离子在衬底中的分布情况。最简单的和最常用的分布是高斯分布,它只用到射程分布的一次和二次矩,其具体形式为¹⁾

$$n(x) = \frac{N_d}{\sqrt{2\pi} \Delta R_p} \exp\left[-\frac{(x-R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right], \quad (30)$$

这里 $n(x)$ 为注入杂质的体浓度分布, N_d 表示每平方厘米面积内注入的离子总数,通常称为剂量, x 表示从衬底表面算起的垂直于表面的深度。图 3 给出了 50~500 keV 的 Al^+ 离子注入 $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ($x=0.2$) 的高斯射程分布图,可见浓度分布是围绕 $x=R_p$ 的对称分布。然而在实际的射程分布中,往往出现不对称性,为了精确地描绘射程分布,需要考虑能包含不对称性的分布,即需要考虑三次以上的分布矩。但就目前的计算和实验精度而言,至多考虑四次矩,而一般对于偏离

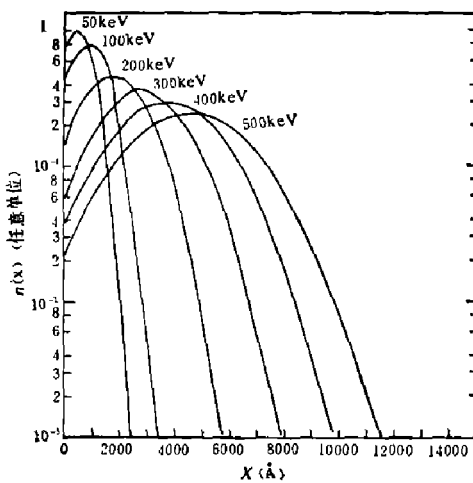


图 3 50~500keV 的 Al^+ 注入 $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ($x=0.2$) 的归一化的高斯分布

对称不太严重的情况,用三次矩描绘就可以了,所以本文提供到三次矩。三次矩比 $\sqrt{\beta_1}$ 称为不对称度或歪斜度。描绘不对称分布可用 Edgeworth 分布:

$$n(x) = \frac{N_d}{\sqrt{2\pi} \Delta R_p} \exp\left[-\frac{(x-R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right] \cdot P\left(\frac{x-R_p}{\Delta R_p}\right), \quad (31)$$

令 $\frac{x-R_p}{\Delta R_p} = \xi$, 则函数 P 的形式为:

$$P(\xi) = 1 + \frac{\sqrt{\beta_1}}{6} (\xi^3 - 3\xi) + \frac{\beta_2 - 3}{24} (\xi^4 - 6\xi^2 + 3) + \frac{\beta_3}{72} (\xi^6 - 15\xi^4 + 45\xi^2 - 15) + \dots, \quad (32)$$

1) 注意:这里深度坐标为 x ,与前面表示碲镉汞组分的 x 有区别。

这里 β_2 是四次中心矩比。我们这里没有给出四次矩的计算, 所以我们采用 Gibbons 等^[9]的方法, 选取 β_1 和 β_2 之间的关系: $\beta_2 = 3 + \frac{5}{3} \beta_1$, 以使 $P(0) = 1$ 。有了这个关系, 则射程分布可写为:

$$n(x) = \frac{N_d}{\sqrt{2\pi} \Delta R_p} \exp \left[-\frac{(x-R_p)^2}{2\Delta R_p^2} \right] \cdot \left[1 + \frac{\sqrt{\beta_1}}{6} (\xi^3 - 3\xi) + \frac{5\beta_1}{72} (\xi^4 - 6\xi^2 + 3) + \frac{\beta_1}{72} (\xi^6 - 15\xi^4 + 45\xi^2 - 15) + \dots \right] \quad (33)$$

图 4 给出了当 $\frac{\Delta R_p}{R_p} = 0.5$ 时, 歪斜度 $\sqrt{\beta_1} = 0.5, 0$ 和 -0.5 三种情况下, 由式 (33) 得到的归一化的 Edgeworth 分布。图中的 $f(x) = n(x) / \frac{N_d}{\sqrt{2\pi} \Delta R_p}$ 。可见, 当 $\sqrt{\beta_1} = 0$ 时, 就得到高斯分布, 而当 $\sqrt{\beta_1} \neq 0$ 时, 曲线是不对称的。

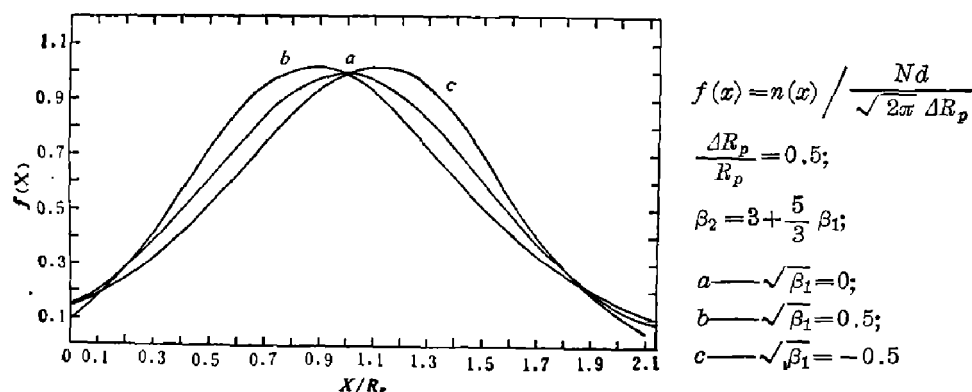


图 4 不同歪斜度情况下的 Edgeworth 分布函数

需要注意的是, 以上计算的射程分布矩是按随机碰撞模型处理的, 即假定靶材料中的原子排列是完全无规则的, 因此这些离子射程理论适用于非晶靶材料。对于小颗粒的多晶材料, 理论与实验也符合得较好, 但对于单晶材料, 问题较为复杂。当入射离子恰好沿晶轴方向入射时, 将出现沟道现象, 这时离子将贯穿得较深, 并可能出现两个峰^[14]。对于单晶靶, 只有当入射离子从所有低指数晶轴的方向偏开适当的角度, 才能避免沟道效应, 得到重复性良好的分布, 在这种情况下, 注入离子的深度分布, 可以采用非晶靶中的射程参数构造。

表 1 中只给出了 $x=0.2$ 情况下 $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ 中的深度分布参数。我们也计算了 x 从 0.19 变化到 0.23 的各种化学配比的 $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ 材料中的离子深度分布矩, 发现在这样小的变化范围内, 射程参数的变化是很小的。例如当 500 keV 的 Al^+ 离子注入时, $x=0.19$ 的情况下, $R_p=4611 \text{ \AA}$, $\Delta R_p=2115 \text{ \AA}$, 而当 $x=0.23$ 时, $R_p=4646 \text{ \AA}$, $\Delta R_p=2118 \text{ \AA}$, 可见 $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ 中的离子射程参数随其化学配比的变化是缓慢的。

为计算方便, 我们简单地采用了 LSS 给出的电子阻止本领公式, 该公式给出的电子阻止本领与入射离子的速度成正比, 而且电子阻止本领随入射离子和靶原子的原子序数 Z_1 和 Z_2 单调上升。但实验上发现电子阻止本领随 Z_1 和 Z_2 振荡, 在本文所讨论的能量范围内, 电子阻止也不严格地与离子速度成正比。有关电子阻止本领的详细讨论, 我们将在另文中给出。

致谢——中国科学院上海技术物理研究所汤定元研究员在百忙中对本文的初稿进行了阅读, 并提出了宝贵的建议, 对此我们深表感谢。

参 考 文 献

- [1] Kolodny A. and Kidron I., *IEEE Trans. Electron Devices*, ED-27 (1980), 37.
- [2] Ryssel H. et al., *IEEE Trans. Electron Devices*, ED-27 (1980), 58.
- [3] Marine J. and Motte C., *Appl. Phys. Lett.*, 23 (1973), 450.
- [4] Fiorito G. et al., *Appl. Phys.*, 17 (1978), 105.
- [5] Lanir M. et al., *J. Appl. Phys.*, 49 (1978), 6182.
- [6] Winterbon K. B. et al., *Mat. Fys. Medd. Dan. vid. Selsk.*, 37 (1970), No. 14.
- [7] Lindhard J. et al., *Mat. Fys. Medd. Dan. vid. selsk.*, 33 (1963), No 14.
- [8] Sanders J. B., *Can. J. Phys.*, 46 (1968), 445.
- [9] Gibbons J. F. et al., *Projected Range Statistics, Semiconductors and Related Materials (2nd ed.)*, Stroudsburg Pennsylvania: Dowden, Hutchinson and Ross Inc., 1975.
- [10] Winterbon K. B., *Ion Implantation Range and Energy Deposition Distributions*, Vol. 2, New York:IFI/plenum Data Company, 1975.
- [11] Kalbitzer S. and Oetzmann H., *Rad. Effects*, 47 (1980), 57.
- [12] Ohu W. K. et al., *Rad. Effects*, 47 (1980), 1.
- [13] Wilson W. D. et al., *Phys. Rev.*, B15 (1977), 2458.
- [14] Mayer J. W. et al., *Ion Implantation in Semiconductors*, New York: Academic Press, 1970, 38~48.
- [15] Grant W. A. et al., *Ion Beam Surface Layer Analysis* (eds.: O. Meyer et al.), New York: Plenum Press, 1976, 235~244.
- [16] Schiott H. E., *Ion Implantation* (eds.: Eisen F. H. and Chadderton L. T.), London: Gordon and Breach, 1971, 197~203.

THEORETICAL CALCULATION OF ION IMPLANTATION PROJECTED RANGE DISTRIBUTION MOMENTS IN $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ SUBSTRATE

XIA YUEYUAN, YANG HONG, HU XIERONG, SUN XIUFANG, GAO SHOUWEN, TAN CHUNYU
(Shandong University)

ABSTRACT

A nuclear scattering function which fits WHB potential very well is used to calculate the projected range distribution moments up to the third order for ion species Al^+ , P^+ , S^+ , Zn^+ , Ga^+ , As^+ and Sb^+ , implanted into $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ substrate. By using the calculated moments, projected range distribution parameters, i. e. the mean projected range R_p , the standard deviation of the mean projected range ΔR_p and the skewness of range distribution are obtained. The energy range selected in the calculations is 50 keV to 1 MeV for Al^+ projectile and 5 keV to 500 keV for other ion species. The results indicate that our calculations agree well with that obtained recently by Russel et al. with LSS reduced energy $\epsilon \geq 0.5$. However, our R_p values are remarkably larger than theirs when $\epsilon < 0.5$. Finally, the method to construct depth profiles of implanted ions by use of the projected range parameters is briefly discussed.