

教程#4——靶损伤的计算

SRIM 的教程一已经说明了如何在硅片上建立一个掺杂剂量峰深度为 250 纳米,分布约为每平方厘米 5×10^{18} 个原子的互补金属氧化物(CMOS)n 型井。现在的问题是选择正确的掺杂物,并确定合适的注入能量和剂量(离子每平方厘米)来获得这个 n 型井。这个教程得出的结论是选择能量为 190keV 的磷离子,注入剂量约为每平方厘米 10^{14} 个离子。

本教程将会详细阐述离子对靶的损伤这一复杂的课题,并会继续使用教程一中的靶来进行这一论述。

通常,在室温 300K 下的注入产生的绝大部分损伤将由于“自退火”而复合。在室温下,晶格原子具有足够的能量使得简单的靶损伤重新形成晶体而使靶损伤消失。一般情况下,相比半导体硅的自退火,金属的要快,而绝缘体的要慢,因而一个硅靶是一个不错的例子。然而 SRIM 没有考虑热效应,因而我们计算的注入损伤发生在温度为 0K 的情况下。忽略热效应会改变最终损伤的大小,但我们要讨论的基本损伤种类仍会产生。

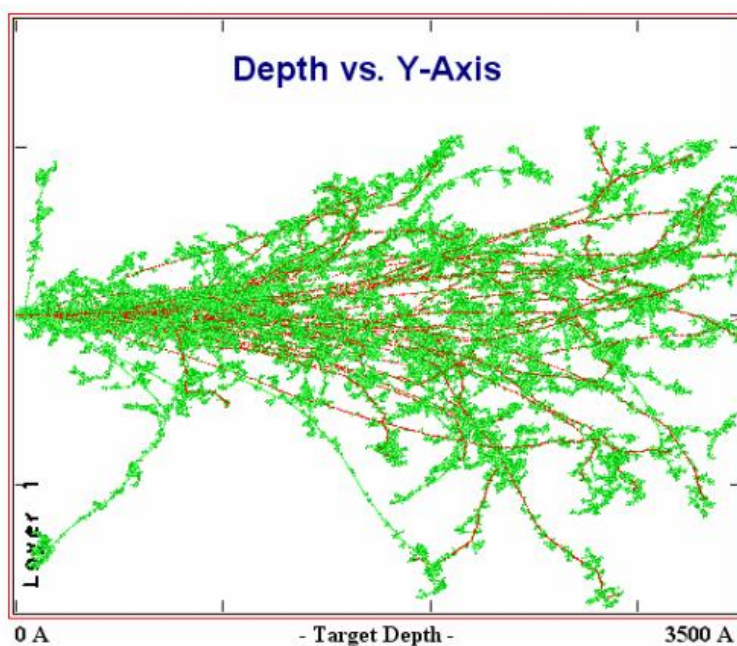
首先,按照在第一课中使用的方式在 SRIM 中设置相同的计算:

- 点击桌面上的 SRIM 图标。
 - 在打开的窗口中点击 **TRIM Calculation**
 - 选择 ION DATA (离子数据) 并点击 **PT** 按键。选择磷元素。
 - 在相同的 ION DATA (离子数据) 线上,在选项框 “Energy (keV)” 中输入 190。
 - 向下移到 TARGET DATA (靶数据)。找到靶的 **PT** 按键。选择硅元素 (Silicon)。
 - 移到这条线的左边,并在 “Width” (深度) 中键入 3500Ang (埃)。
 - 移到这条线的左边,并在 “Layer name” (层名) 中键入 “Silicon” (硅) 来代替 “Layer 1”
 - 移到右上角的 “DAMAGE” (损伤) 选项。向下滚动后选择 “Detailed Calculation with Full Damage Cascades” (利用完整的级联损伤详细计算) 选项卡。
 - 安装完成。查看所有的选项卡,检查是否已经输入了正确的数值。同样检查一些其他的输入。可以按下帮助键 **?** 获取每个输入项的详细说明。
 - 最后,按下 **Save Input and Run TRIM** 键。
-

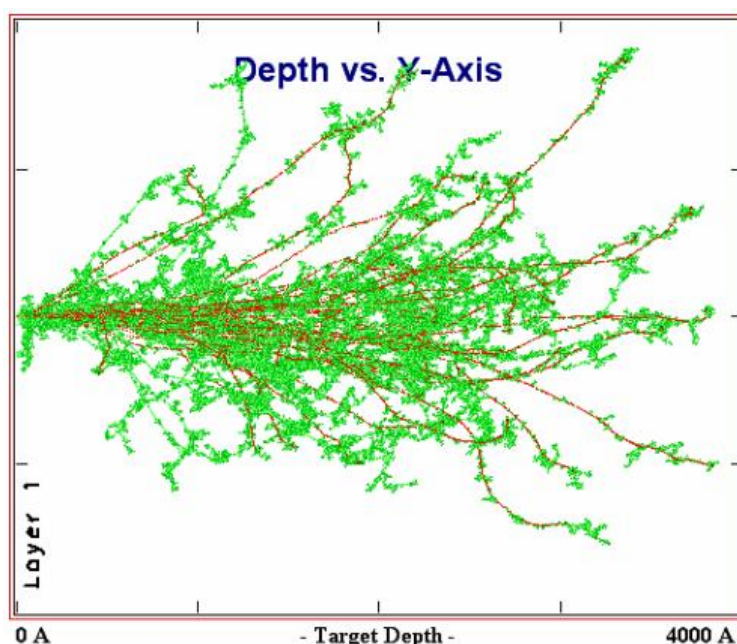
TRIM 开启，计算马上开始

在中间有一个图像展示了每个离子的计算结果。红色的小点是离子和靶原子之间的碰撞，在这些碰撞中靶原子从它们原来的晶格位置中被撞击出来。绿色的点是在反冲靶原子硅和其它靶原子之间的碰撞。反冲靶原子造成级联碰撞在损伤过程中占据多数。只有当能量转移大到可以将原子撞击出其晶格位置时这些点才会被绘入图中。这样一来这个图像展示了已经发生错位的原子数量。每个离子停止的地方用黑色的点，但是单独的一个黑色像素点太小了，以至于在现代高分辨率的屏幕上很难看到。

注意到左上角的“ION”重复离子信息的选项框。注意“TARGET DATA”窗口包含了所有的靶信息（你可能需要使用光标展开这个窗口）。其中的一些信息可能不是你输入的，例如移位能（Displacement Energy : 15eK）、表面束缚能（Surface Binding Energy: 4.7eV）和晶格束缚能（Lattice Binding Energy: 2eV）。这些给出的数值是硅的默认值。这些将会在本教程的后面给出详细解释。



首先，为了更好地理解理解 TRIM 的灵活性，我们将演示一些 TRIM 的控制功能。点击 **Pause** 键来暂停计算。点击 **Change TRIM** 键。这将使你可以通过改变输入值来修改计算。举个例子让我



们将反冲原子由绿色改为蓝色。（注意如果有人曾在你的电脑上改变过 SRIM 的默认颜色，那么上面提到过的颜色可能有所不同）。点击标记为“**Moving Atom Colors**”的颜色方框。一个调色板将会出现。选择蓝色，然后依次点击 **OK** **End Edit** **Continue** 键。当新的反冲硅原子产生一个空位时它们将会被标记成蓝色。这些蓝色的小点会被大量绿色的“阻止原子”硅所淹没，但是你应该可以在级联碰撞中看到一些。

注意在一张离子径迹图中，一些离子看起来正在从右端离开靶。这个靶要阻止所有的离子还不够深。要修正这一点，点击来暂停 **Pause** 计算。现在点击后在 **Target Data** 窗口中点击 **Width (A)** 中的 3500。一个对话框将弹出，从中将把深度改变为 4000。你同样需要改变左边图像窗口中的 **Plot Window**。这也要被改成 4000，这样你才能看到这个靶深度。完成这个修正后，依次点击 **End Edit** **Continue** 既然我们是在 TRIM 中进行一项非常基础性的改变，计算会重新开始。图像会被改变了，而它现在展示了 0-4000Å 深度的情形。并且现在所有的离子都在它们离开图像右端之前停止下来了。

进行这项练习的目的是告诉你没有必要知道所有的变量才开始 TRIM。因为可能你不确定射程最远的离子所能到达的位置。你可以用一个粗略的值开始 TRIM 计算，然后在你看到了实际的情形后可以将它们改变到更加合理的值。

在你阅读下面的两页说明时，让 TRIM 继续计算。

科学背景——“级联反冲中的物理原理”

这个部分探讨对载能离子给固体靶造成损伤的估计中需要使用的术概念。我们首先需要阐明一些基础的概念。

靶损伤中不同的部分定义如下：

- **移位**：一个载能入射粒子将一个晶格原子撞击出它初始位置的过程
- **空位**：一个空的晶格位置（没有原子）。一开始所有的晶格位置都被占据，然后移位过程产生了空位。
- **填隙原子**：晶体中的原子被撞击出原有的位置并停留在固体中。当入射到固体中的

离子停留在固体中时，也被视为填隙原子。

- **碰撞复位**：填充了空位的和初始原子相同（这一点将会在下面讨论）的新原子。这是唯一可以让空位可以被复合的机制。
- **移位能 (E_{disp})**：即将一个靶原子从其晶格中的位置撞击出足够远的距离使得它无法迅速回位所需要的最小能量。这个最小能量产生一个弗伦克尔对，即一个空位和一个临近的填隙原子，而这是离子产生的损伤中最基本的一种类型。
- **晶格束缚 (E_{latt})**：将一个原子从晶格中移除出来所需要的最小能量。克服电子束缚并将原子从晶格中移位出来是需要能量的，因而这部分被转移到反冲原子中的能量被丢失了。晶格结合能必然小于错位能。
- **表面束缚能 (E_{surf})**：靶表面的原子在靠近表面一端未被束缚，因而将其从晶格位置中移除出来所需的能量相比在固体内部被其他原子包围时要小。一个表面原子具有更少的电子束缚需要被打破。这个能量在计算溅射（表面原子的移除）时特别重要。
- **运动原子的最终能量 (E_{final})**：具有低于该能量的原子被认为是静止在固体中的。离子动能的计算必须在某个最小能量下停止。不同过程的能量损失在离子减速时变得更小，而一个最小能量能产生一个更有效的计算结果。最终能量小于上面任意一个能量。

对于硅靶，默认值为： $E_{\text{disp}}=15\text{eV}$ ， $E_{\text{latt}}=2\text{eV}$ ， $E_{\text{surf}}=4.7\text{eV}$ 以及 $E_{\text{final}}=2\text{eV}$ 。

如果一个运动的原子撞击了一个靶原子，并且传递给了后者超过 E_{disp} 的能量，那么靶原子将会被撞击出其晶格位置。由于它将损失 E_{latt} 的能量到晶格中去，因而它的反冲能量 $E_{\text{recoil}}=E_{\text{disp}}-E_{\text{latt}}$ 。如果反冲靶原子的能量大于 E_{disp} ，那么它将继续通过撞击其它靶原子来产生更多的空位

有一种特殊的损伤必须要考虑到。如果入射原子与它撞击的原子是相同的元素，那么入射粒子可能会将其能量转移给靶原子，将它撞击出晶格位置，而入射原子将会占据靶原子在晶格中的位置，这被称为**复位碰撞**。尽管听起来很复杂，但是这种机制可能会降低总空位的30%。要发生复位碰撞有需要满足三个基本条件：

- 1) 入射原子必须和靶原子相同。
- 2) 入射粒子残留的能量必须小于 E_{final} （它必须停下来）。
- 3) 被撞击的原子必须拥有足够的能量来继续移动，也就是说它的能量要大于 E_{disp} 。

计算级联反冲、靶损伤、复位碰撞等过程需要特定的假设，下面来明确其定义：

- 假设入射粒子原子序数为 Z_1 能量为 E 。它和原子序数为 Z_2 的靶原子发生碰撞。在碰撞之后入射粒子能量为 E_1 并且被撞击原子能量为 E_2 。
- 当 $E_2 > E_{\text{disp}}$ （被撞击原子得到了足够的能量离开原来的位置）时会产生移位。当 $E_1 > E_{\text{disp}}$ 和 $E_2 > E_{\text{disp}}$ （两个原子都有足够的能量离开碰撞位置）同时满足时**空位**就会产生。之后两个原子都会变成级联碰撞中的运动原子。原子 Z_2 的能量 E_2 在它进行下一个碰撞之前会因为 E_{latt} 减小。如果 $E_2 < E_{\text{disp}}$ ，那么被撞击原子没有足够的能量，因而它将通过振动返回到它原来的位置并以**声子**（晶体中晶格振动沉积的能量）的形式释放出能量 E_2 。
- 在一个碰撞以后如果 $E_1 < E_{\text{disp}}$ ， $E_2 > E_{\text{disp}}$ 并且 $Z_1 = Z_2$ ，那么入射原子将会在碰撞处停下而形成**复位碰撞**，其中 E_1 的能量以**声子**的形式被释放。晶格位置中的原子通过交换保持为相同种类的原子。这种形式的碰撞在单元素靶中发生大的级联反冲时是很常见的。如果 $E_1 < E_{\text{disp}}$ ， $E_2 > E_{\text{disp}}$ 并且 $Z_1 \neq Z_2$ ，那么 Z_1 变成了停止下来的**填隙**原子。
- 最后，如果 $E_1 < E_{\text{disp}}$ 并且 $E_2 < E_{\text{disp}}$ ，那么 Z_1 将变成**填隙**原子，而 $E_1 + E_2$ 以**声子**的形式被释放。如果你的靶内有几种不同的元素，并且每一种都有一个不同的错位能，那么当每个级联反冲原子在撞击不同靶原子时 E_{disp} 将会变化。

这些不同损伤类型的总和是相关的。如果你理解了下面两个方程，那么你已经对上面的定义有了一个较好的掌握。

$$\text{移位} = \text{空位} + \text{复位碰撞} \quad (\text{方程一})$$

$$\text{空位} + \text{复位原子} = \text{填隙原子} + (\text{离开靶的原子}) \quad (\text{方程二})$$

如果一个级联反冲原子离开了靶，它就不再被跟踪了。也就是说如果它离开了靶的前表面或者后表面，他就被丢弃了。TRIM 会不停地追踪在靶内部侧向运动的原子，即使它们已经离开了屏幕显示的范围。但是一旦它们穿过了靶的任何一个表面，它们就被丢弃了，不再被计数。这也是靶内部产生了空位，且一个运动的反冲原子最后停留的地方可能离它产生的空位有一段距离的原因。如果一个反冲原子离开了靶，很显然填隙原子的总数与空位的总数相比将会有有一个差额，这个差额就是以某种形式脱离靶的原子数。每个复位碰撞会减少空位数并减少一个填隙原子，这使得上面的第一个方程得以平衡。

对于那些使用 TRIM 来快速计算靶损伤的人，TRIM 使用了 Kinchin-Pease 解析法，它被后面的两位作者修改过。这个议题在 TRIM 的课本中将会被涉及到。请参阅第七章“TRIM 的科学背景”。

下面的文献可以用来进行背景的深入了解：

1. Kinchin and R. S. Pease, Rep. Prog. Phys., Vol. 18, 1 (1955).
2. P. Sigmund, Rad. Eff., Vol. 1, 15 (1969).
3. M. J. Noregett, M. T. Robinson and I. M. Torrens, Nuci. Eng. Design, Vol. 33, 50 (1974)

问题—测试你能否不回去查阅直接回答下面的问题。然后检查你的回答是否正确（答案在这个教程的末尾）。

- 1) 是否靶原子的每个移位都能产生一个填隙原子？
- 2) 对于一种靶原子，晶格结合能和表面结合能之间的区别是什么？
- 3) 如果你将硅离子注入到硅原子靶中去，入射硅离子能否产生一次“复位碰撞”？为什么？

电离能损和声子能损

现在我们将来看两种简单的图像：电离和声子

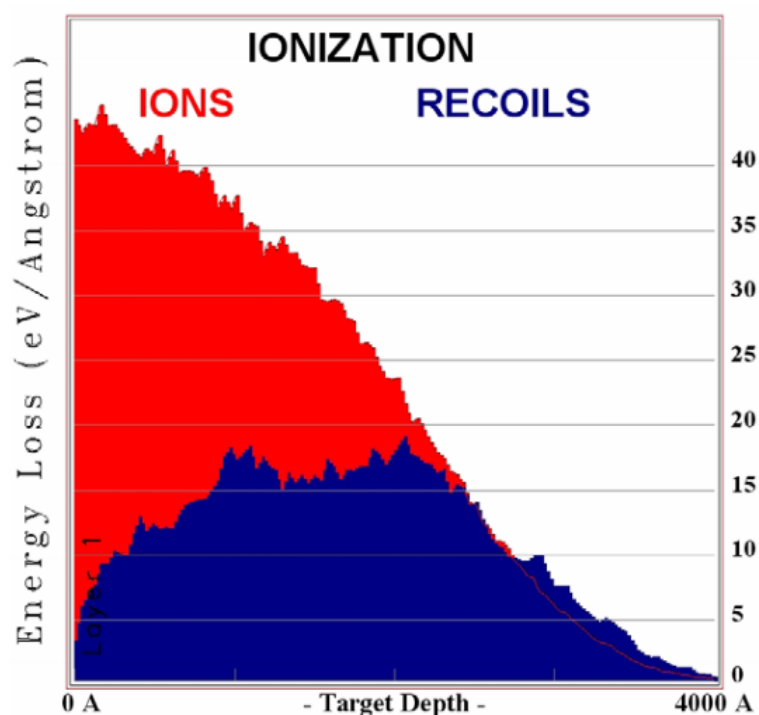
电离能损是指损失给靶电子的能量。靶中的电子会从快速运动的离子和反冲原子中获得能量，然后以热量（金属靶）或者声子（绝缘体靶）的形式来释放掉这部分能量。这个图展示了从入射粒子以及反冲靶原子中获得的电离能。

声子是在晶体中的原子震荡能。由于晶体中所有的原子都是相关的，当你使

它们中的一个开始震荡时，其他原子也会开始震荡。由于从某种意义上来说它是量子化的（特定的震荡模式具有优越性），这种质量震荡被描述为声子。

我们假设当你阅读完上面的所有定义和说明时 TRIM 已经开始运行了。

通过点击在作图窗口中的选项框打开电离图（在前面查看作图工具的介绍）。这里有两种不同的图像，一种是从入射离子中损失给电子的能量，而另一个是从反冲靶原子中损失给电子的能量。通常来说，离子具有更大的电离能损，但是并不是对所有的离子/靶的组合是这样的。电子对与其运动速度近似的粒子能量的吸收具有最高的效率。相比反冲硅靶原子，



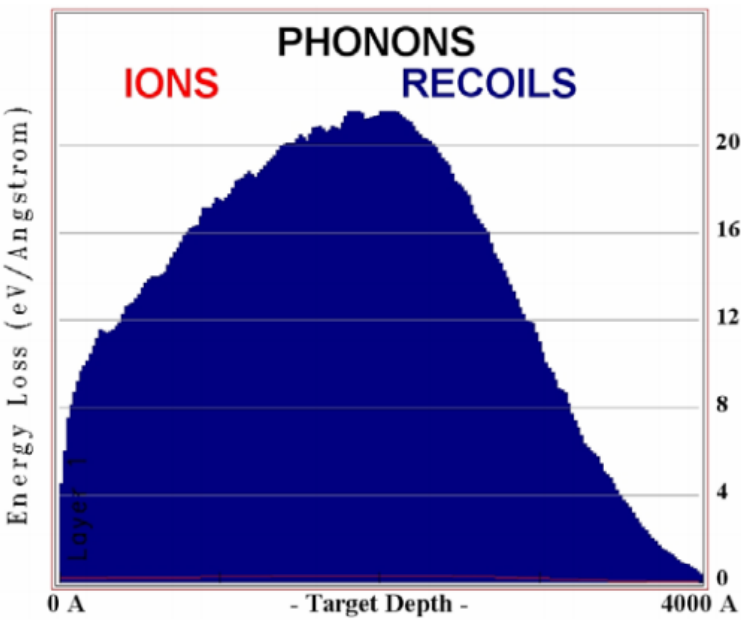
入射离子运动的快得多。所以离子损失更多的能量给靶电子。

关闭电离图，打开声子图。

这个图像展示了声子能损相比电离能损非常不同。你很难可以看到从离子（图像底部的红色线）中损失能量给声子，而声子几乎全是通过反冲靶原子产生的。这些反冲声子由何而来，我们还不是十分清楚（将有另一张图像对此进行解释），但是你可以查看名为 Calculation Parameters 的窗口。这个名为“%Energy Loss”的部分展示了每个离子的入射能量（190keV）是如何耗散的。名为 Phonons 的一行显示离子只将其约 0.44% 的一小部分能量损失给了声子（ $190\text{keV} \times 0.44\% = 836\text{eV}$ ），而反冲原子转移了约为 30% 的能量给声子（ $190\text{keV} \times 29\% = 55\text{keV}$ ）。

那么声子是如何产生的呢？

声子来自于几种途径。当一个原子从它们晶格中的位置被撞击出来时，它的结合能 $E_{\text{latt}} = 2\text{eV}$ 被转移到反冲原子产生的声子中。如果你查看 TRIM 中右上角的选项框，你将会看到每个离子产生的空位数，Vacancies/Ion（空位/离子比）约为 2300。因而对于每个离子，通过离子或者级联反冲产生的错位能产生 $2300 \times 2\text{eV} = 4600\text{eV}$ 的声子。



剩下的声子是由撞击到晶格原子并转移了小于 E_{disp} 的能量的离子或者反冲原子产生的。至少 E_{disp} 的能量需要被转移到靶原子中才能将它从本身的位置中驱逐出去。那如果转移的能量小于这个值会发生什么呢？那么靶原子会反冲并震荡一会儿，但由于没有足够能量冲出原来的位置，最终这个能量会被转移给新的声子。

在 TRIM 右边名为“%Energy Loss”的选项框可以将入射粒子能量以包括声子的不同类型进行统计。入射粒子会将其入射能量 190keV 的 0.44% 产生声子，而

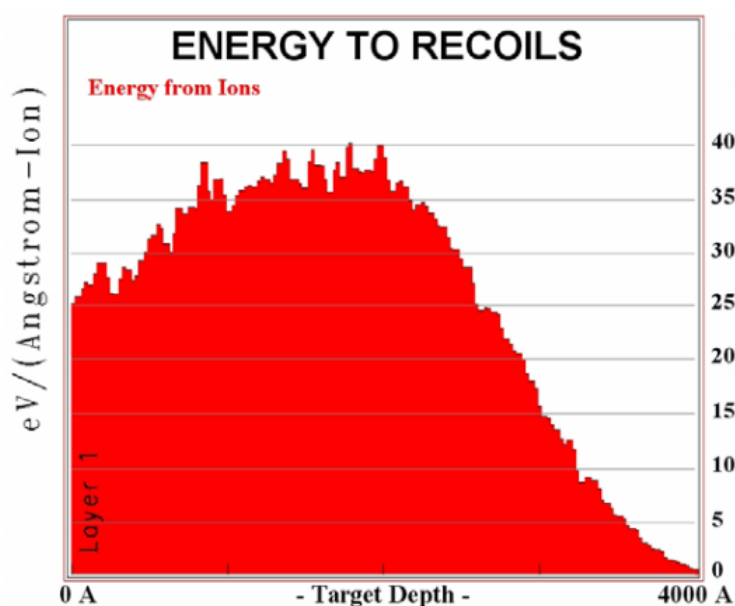
% ENERGY LOSS	Ions Recoils	
	Ions	Recoils
Ionization	44.31	23.77
Vacancies	0.13	2.51
Phonons	0.44	28.85

反冲原子贡献了额外的 28.8%，两者总共为 29.2%。乘以离子总能量，可以得到每个入射离子产生 $190\text{keV} \times 29.2\% = 55\text{keV}$ 的声子。假设声子直接附加到靶温度中去，这会使得靶变得非常炽热。关闭声子图像。

靶中的损伤的生成

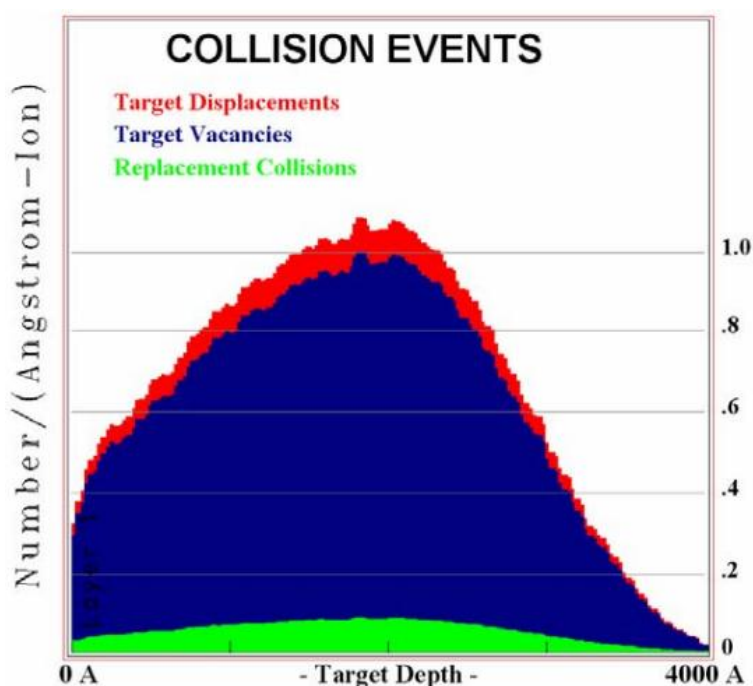
下面的两张图像将展示靶中的损伤是如何产生的。在 Plot 窗口中点击：**Energy to Recoils**。一个对话框将会询问你是想要为 **Energy from Ions**（离子中的能量）还是 **Energy absorbed by Silicon atoms**（硅原子吸收的能量）作图。

你可以选择任意一个。如果靶中有不止一种元素而又想要看到每种元素吸收了多少能量时这个选择是重要的。对于我们的简单情形，只有一种图像，因为所有离子沉积的能量都被硅原子吸收了。对于单元素靶这两种图是相同的。



转移给靶原子的能量在离子平均射程（约为 2500Å）之前几乎保持不变，随后它随着离子的停止迅速减小。其他的离子/靶组合情况可能与此非常不同。

有多少的能量转移给了级联反冲呢？再次查看“%Energy Loss”选项框，我们可以将沉积到反冲原子中的能量累加起来： $24\% + 3\% + 29\% = 56\% = 106\text{keV}$ 。因而离子直接地沉积了 44% 的能量给靶原子，而放弃了 56% 的能量给级联反冲原子。关闭 Energy to Recoils 图。



打开图像: **Damage Events**。

一个包含了所有损伤细节的菜单会弹出。点击图像**#1 (Total Displacements)**, **#2 (Total Vacancies)**和**#3 (Replacement Collisions)**。然后点击: **Show Plot Numbers 1 2 3**。

顶部的曲线展示了 **Total Target Displacements**。这是被撞击出它们原本靶晶格中位置的原子数。接下来往下的一条曲线展示的是 **Target Vacancies**。这个相比靶错位曲线较低, 表明空位数相比错位数较少。

为什么空位数少于错位数呢?

最底部的曲线展示的是 **Replacement Collisions**。这些是入射原子失掉了几乎所有能量后不足以再继续往前走而进入反冲靶原子遗留下来的孔穴中所产生的移位。也就是说它撞击出来一个靶原子, 然后在晶格中替代它。由于是相同的元素, 结果在靶中没有变化。正如你能看到的, *较低的两条曲线的和等于较高的错位曲线*。记得在**级联反冲中的物理**中展示的方程吗:

$$\text{错位} = \text{空位} + \text{复位碰撞}$$

在这个情形中, 几乎 10%的错位原子没有剩下空位, 而是被另一个硅原子替代了。

复位碰撞是靶错位的一个重要成分吗?

在这个例子中它们降低了多少的靶损伤?

该教程中问题的答案:

谨记靶损伤的两个基本方程:

$$\text{错位} = \text{空位} + \text{复位碰撞} \quad (\text{方程一})$$

$$\text{空位} + \text{复位原子} = \text{填隙原子} + (\text{离开靶空间的原子}) \quad (\text{方程二})$$

- 1) 是否靶原子的每个移位都能产生一个填隙原子?

不是。结合方程一和方程二时我们得到:

$$\text{错位} = \text{填隙原子} + (\text{离开靶空间的原子})$$

只要级联碰撞保持在靶空间以内, 那么每个移位将会产生一个填隙原子。如果反冲原子离开了靶, 那么它们没有被计入填隙原子。如果你也将停留在靶中的入射离子计入在内, 那么填隙原子的总数会增加, 但这是在通常计算错位原子减去离开靶空间原子数时的一个例外

- 2) 对于一种靶原子，晶格结合能和表面结合能之间的区别是什么？

晶格结合能：将一个原子从晶格中移除出来所需要的最小能量。打破电子束缚并将原子从晶格中移位出来是需要能量的。

表面结合能：靶表面的原子靠近表面一端未被束缚，因而将它从晶格位置移除出去所需要的能量小于固体内部被其他原子围绕的原子。一个表面原子需要被打破的电子束缚更少，因而通常我们认为表面结合能小于晶格结合能。

-
- 3) 如果你将硅离子注入到硅原子靶中去，入射硅离子能否产生一次“复位碰撞”？为什么？

可以。尽管通常来说我们定义复位碰撞是一个反冲靶原子撞击出另一个相同元素的靶原子，然后在晶格中代替它。由于是相同的元素，它代替了原来的原子后在靶晶格处并没有改变。然而，如果你的离子是和靶原子相同的元素，它也能撞击出这些原子中的一个并代替它。但这不是一个通常的情形，而通常来说我们会扩展“**复位碰撞**”的定义使得它包括这些罕见的情形。
