

教程#1——离子在固体中的射程、剂量及辐照损伤简述

该教程将介绍如何确定离子的能量和剂量，使其注入靶后能达到所需要的浓度和深度。为了说明这一点，我们以在 CMOS 半导体器件中注入 n 型阱为例。注入硅中的离子（即注入原子）应为 n 型元素，并在表面以下约为 250 nm(2500Å)深处达到浓度峰值（以投影射程计）。掺杂原子的浓度峰值为每平方厘米 5×10^{18} 个离子。尽管这看起来有些复杂（特别是如果你不是一个电气工程师的话），但它只要求磷（P）或砷（As）或锑（Sb）元素的离子被直接注入到样品的一定深度并形成一定的浓度（磷、砷和锑都可以作为硅中的 n 型掺杂剂）。

作为一个附加条件，我们假定注入离子（即加速器加速的粒子）的能量不超过 200keV。

【注意：TRIM 很多情况下使用 Å（埃）作为单位是因为其大约是固体中单层原子的厚度。这一点在估计靶的微观损伤是经常能用得到。】

问题：

- 注入何种元素？
- 需要注入多大的剂量（ions/cm²）？
- 在注入后靶是否会产生非晶化？

解决这一系列问题将是该教程的主旨。在阅读完本教程之后，你将能够回答将任意离子注入到任意靶情况下的这些问题。

确定入射离子的种类和能量

- 点击桌面上的 SRIM 图标
- 点击 **Stopping and Range Tables**（S&R Tables）
- 首先输入离子。开始可以点击在“ION”旁边上的帮助按钮。 ? 阅读后点击 CLOSE 键关闭窗口。
- 为了在硅中注入形成一个 n 型阱，你需要从元素周期表的第五列中选择一种元素作为掺杂元素注入。典型的掺杂元素是磷（P）、砷（As）或锑（Sb）。我们选项居中的**砷（As）**开始。要键入一种离子，点击窗口中 **Ion** 边上的 PT 键打开元素周期表并选择 **As** 作为入射离子。
- 程序将会自动填充描述入射离子性质的各种选项框。注意到其使用的离子质量并不是砷的平均原子质量，而是丰度最大同位素（MAI）质量。你可以通过使用元素周期表键

PT

来验证，它会给出各种砷原子质量的说明。

- 在窗口中向下来到了 **Target** 按钮。点击帮助 ? 按钮。
- 指定靶的成分为**硅**，利用 PT 按钮选定 **Si**。
- 注意到此时靶原子的质量不再是其最大丰度同位素（MAI）质量，而是元素的平均自然质量。你可以通过使用元素周期表键 PT 来验证，它会给出各种硅原子质量的说明。点击按钮 Close 关闭窗口。
- 剩下的描述靶的表格是空白的，也是非必须的。选项“Stoich”用于计算复合材质靶时指定其中每种元素的化学计量。
- 点击 Calculate Table
- 我们将计算结果保存在如下文件：“SRIM Outputs\Arsenic in Silicon”。如果你需要再次查询它的话，它在 SRIM 中的路径为：.../SRIM Outputs/

观察这个表格。2500 Å 的**投影射程**（峰浓度的深度）对应多大的入射离子能量呢？（答案是~400keV）

Ion Energy	dE/dx Elec.	dE/dx Nuclear	Proj. Range	Longit. Strag.	Lateral Strag
350.00 keV	1.876E+00	4.139E+00	2243 A	557 A	436 A
375.00 keV	1.944E+00	4.049E+00	2404 A	590 A	462 A
400.00 keV	2.013E+00	3.964E+00	2566 A	622 A	489 A
450.00 keV	2.150E+00	3.804E+00	2892 A	685 A	542 A
500.00 keV	2.285E+00	3.659E+00	3221 A	746 A	595 A


- 结论：这是一个高于你所使用的 200keV 的离子注入机所能达到的能量！
- 重新计算这个射程表格，但是使用磷（P）离子入射。
- 观察新的表格。要有 250nm 的射程需要多大的能量呢？

Ion Energy	dE/dx Elec.	dE/dx Nuclear	Proj. Range	Longit. Strag.	Lateral Strag.
170.00 keV	1.789E+00	1.136E+00	2232 A	682 A	540 A
180.00 keV	1.833E+00	1.107E+00	2359 A	709 A	565 A
200.00 keV	1.914E+00	1.054E+00	2612 A	761 A	615 A
225.00 keV	2.008E+00	9.960E-01	2928 A	823 A	674 A

- 这张表格表明我们可以注入 190keV 的磷离子产生一个浓度峰值在 2500Å(250nm)


的 n 型阱（在标出的两个范围之间使用内插法可得）。关闭这个表格窗口。

- 在离开 Stopping and Range 窗口前，观察 **S&R Tables** 的其他帮助信息

（点击  按钮）

- 点击按钮  回到 SRIM 的主页面。

190keV 的磷离子产生的损伤


- 在主菜单上在 TRIM Calculation 按钮旁有一个帮助  按钮。点击它来阅读该程序的帮助菜单。

- TRIM (Transport of Ions in Matter) 是一个非常复杂的程序。它不仅可以描述离子在物质中的射程，还可以详细计算注入离子在慢化过程中对靶造成的损伤等其他信息。它可以使用动画让你看到离子注入到靶中的全过程，并给你展示级联反冲粒子和靶原子混合在一起的情形。为了精确估计每个离子和靶原子间相遇时的物理情形，程序只能一次对一个粒子进行计算。这样的话，计算可能消耗可观的时间——计算每个离子花费的时间从一秒到几分钟不等。而精确度由模拟采用的离子数来决定。典型的情况是，应用 1000 个离子进行计算将得到高于 10% 的精确度。

- 点击主菜单上的  按钮。

- 下一个窗口是 TRIM 计算的设置。由于我们需要输入许多靶结构的细节信息，因而相比简洁的 Table of Ranges 设置表格，它包含了更多的选项。

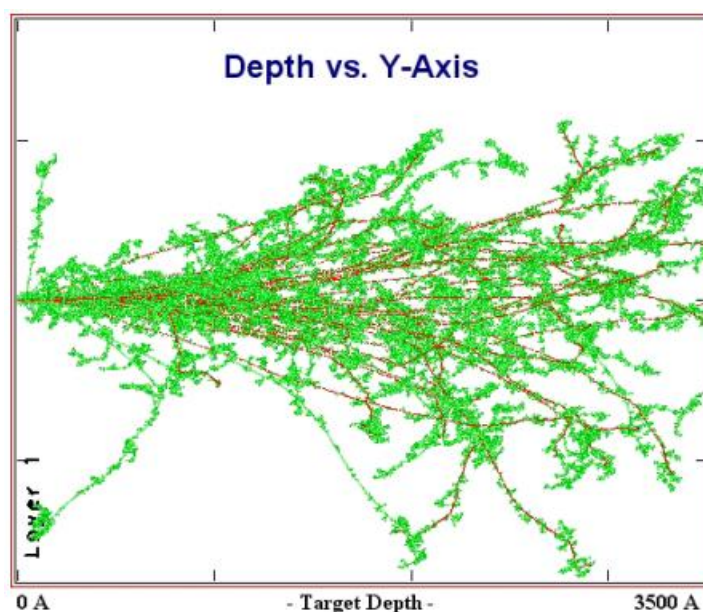
- 在 ION DATA（离子数据）中点击 PT 按钮。选择磷元素。注意离子的其他参数会被自动填入。
- 在这个相同的 ION DATA（离子数据）输入窗口“Energy（keV）”下的选项框中填入 **190**。这是我们刚刚从 SR 结果表格中得到的可以将磷在硅靶中射程深度峰值控制在 250nm 的能量值。
- 继续设定 TARGET DATA（靶数据）。由于可以设定层数非常多（最多为 20）由复杂混合物构成的靶，这个窗口可以变得非常复杂。我们将在下一个教程中学习这些复杂模型的设定，但是在这个练习中我们将只使用一个简单的硅基体。
- 找到靶的 PT 按钮。打开元素周期表窗口并选择 **Si**（硅）。
- 在这一栏输入窗口的左边的“Width”（深度）*处键入 **3500 埃（Ang）**，这是靶的厚度。
由于我们不关心比 250nm 更深的地方会发生什么，因而这样的靶厚度足够了。
- 在 TARGET DATA（靶数据）输入的左边“Layer Name”（层名）处键入“**Silicon**”（硅）（以代替默认的 Layer 1）。
- 接下来我们将考虑需要进行计算的类型。**TRIM** 既可以进行一些概略计算，如阻止本领和射程（SR）的计算，其执行时间通常不超过一秒，也可以进行一些复杂计算，如离子和靶之间每次相互作用的详细计算，在这种计算中，模拟每 100 个离子可能需要花费几个小时。计算类型可使用“Type of TRIM Calculation”（TRIM 计算类型）下面的两个下拉菜单来设置。
- 注意右上角的选项框“DAMAGE”。在它右边是帮助 ? 选项框。点击它来阅读关于可以进行的损伤计算的类型。尽管看起来非常复杂，但是在下面的课程中你将学会使用它们进行各种特殊情形的计算。
- 下拉 DAMAGE 菜单选择“Detailed Calculation with Full Damage Cascades”。

- 在这个选项框下面是可供选择的基本图像绘制模式。现在你可以忽视这个选项。我们将会做出各种图像，但我们将在计算按照需要改变它们。
 - 最后，在窗口中部的最右边接近“Damage (eV)”选项框的边上有另一个帮助  选项框。你可以查看它以了解产生各种特定种类的损伤所需要的不同能量。我们将在下一个指南深入讨论这个问题，但是你应该了解这些概念：移位能 (Displacement energy)、表面束缚能 (Surface binding energy) 和晶格束缚能 (Lattice binding energy)。
 - 设置已完成。查看所有的选项框确定你能明白其意义。点击帮助按钮来获得相关说明。
 - 最后点击 **Save Input and Run TRIM** 按钮
-

损伤的 TRIM 计算结果

TRIM 计算开始。当 TRIM 生成描述你的靶的内部表格时会有一段时间间隔。之后你将看到第一个离子的径迹。在离子每产生一个空位（即将一个硅原子撞离它在晶格上的格点位置）离子径迹都会用一个红点来表示，而绿点是由反冲的硅原子产生的空位。

- 可以注意到离子总是会造成损伤（红点），而在反冲硅原子产生所谓的**级联反冲损伤**的位置会有成群的绿色小点。
- 每次磷离子猛烈地撞击到一个硅原子上，它将转移相当一部分能量给硅原子。从磷原子和硅原子具有几乎相等的质量，我们可以知道这是正确的。如果离子和靶原子的质量相差很



大，那么转移给靶原子的能量就会非常小。这是两个粒子间弹性碰撞的基本物理现象。

每次离子和硅之间发生猛烈的碰撞，并产生一条绿色的级联损伤线，离子有很大可能会改变运动方向。由于你只能看到两个坐标轴定义的区域之上的图像（即二维图像），一些三维空间中偏转的情况可能会变得不可见。

- 几乎每次离子和一个靶原子碰撞，就会有一个空位（一个红点）产生。靶原子随后反冲回来，并且它所有产生空位的碰撞都用绿色小点在图中标出。单个反冲原子最多可以产生 1000 个空位（绿色），而离子只产生一个空位（红色）。

- 在 **TRIM Calculation Window**（计

算窗口）的左边的一个叫做

DISTRIBUTIONS（分布）的表格

中有各种按钮。左边的一列按钮

?

是每种图像的帮助中心

单。第二列 **File** 按钮

在硬盘上生成文档（请勿点击它们）。

第三列（白色方形框）是用

于选取图像。我们将在进行下面的

入射选项时用到这些命令。当你点击任意一个按钮后，在对正在进行的离子入射计算完

成前有一个停顿，之后命令才会被执行。因而你需要耐心等待。当你查看任意图像时计

算会继续进行，并且这些图像会在每个离子入射后被更新。

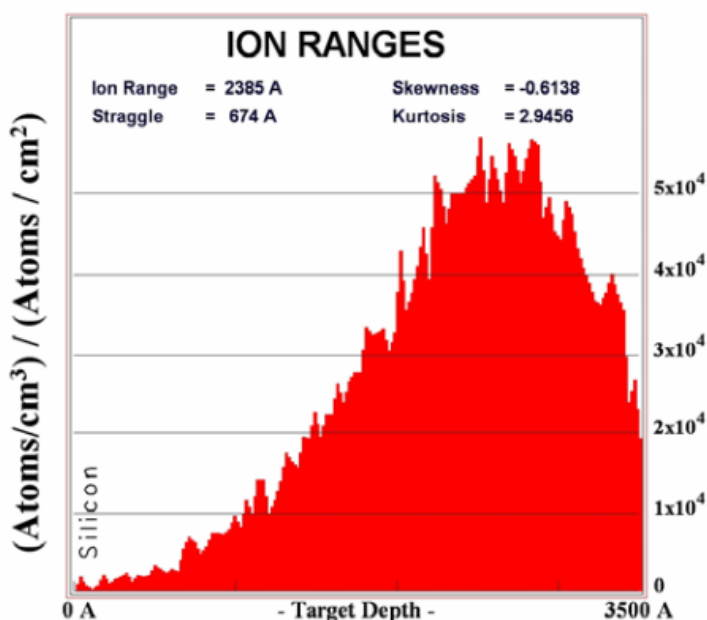
- 最顶端的图像是 **ION DISTRIBUTION**（离子分布）。阅读帮助选项

?

 并熟悉它

们。现在点击这个选项中的作图选项。一个标题为 **ION RANGES**（离子射程）的图像

就会产生。你将会看到磷离子（190keV）在硅靶中的分布。这个“离子射程”大约为



2400-2500 Å。我们设置了靶厚度大约为 3500 Å，使得我们在此图像中能够获取大部分的离子。注意坐标单位：“(Atom/cm³) / (Atoms/cm²)”。尽管这些单位看起来很奇怪，当你乘以一个注入剂量 (ions/cm²) 时，你将会最终得到杂质分布 (atoms/cm³) 对深度的曲线。这是非常好的！你想要一个约为每平方厘米 5×10^{18} 的掺杂峰浓度。试想如果你可以判定这一参量的话，每平方厘米 10^{14} 个磷原子的注入剂量就足够了。这对于 n 型阱的掺杂将是完美的。

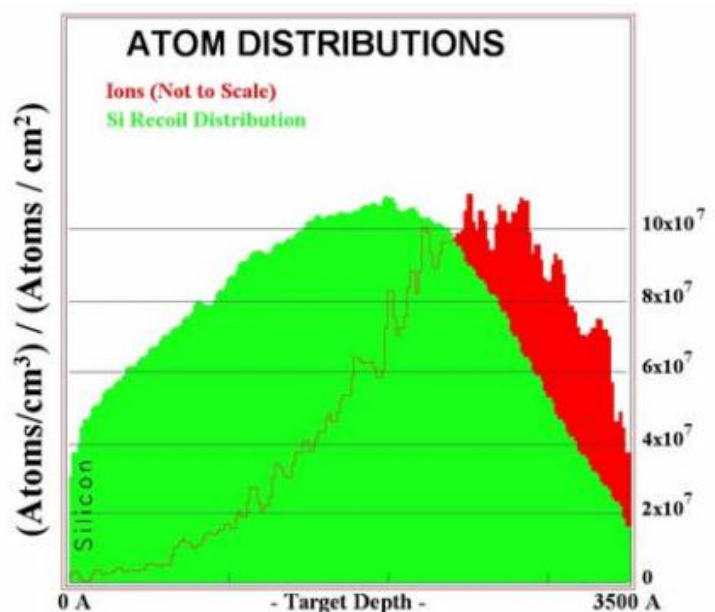
- 如果你想要掺杂峰浓度为每平方厘米 10^{17} ，那需要多大的磷原子注入剂量呢？
- 注意到这个分布的更高级的参数(straggle 歧离度、skewness 偏度、kurtosis 峰度)在图像上面给出。这些都在图像的帮助菜单中简略地进行了讨论。要得到更详细的说明，点击顶部的“Help, FAQ and Scientific Explanations”键，选择“TRIM FAQ and Solutions”，然后选择“Statistics of Range Distributions”。阅读它可以理解这些选项使用的不同的统计办法以描述最后的离子分布。
- 关闭射程图窗口（每个打开的图像窗口都会减慢计算速度）。

- 接下来我们要来关注 **Ion/Recoil Distribution**。点击帮助 ? 选项键来获得其内容。在帮助窗口的底部是一个典型硬盘文件的拷贝。

- 选择 **Ion/Recoil Distribution** 图像。

注意“Ion”图（红色）和在 Ion Distribution 中展示的图是相同的。

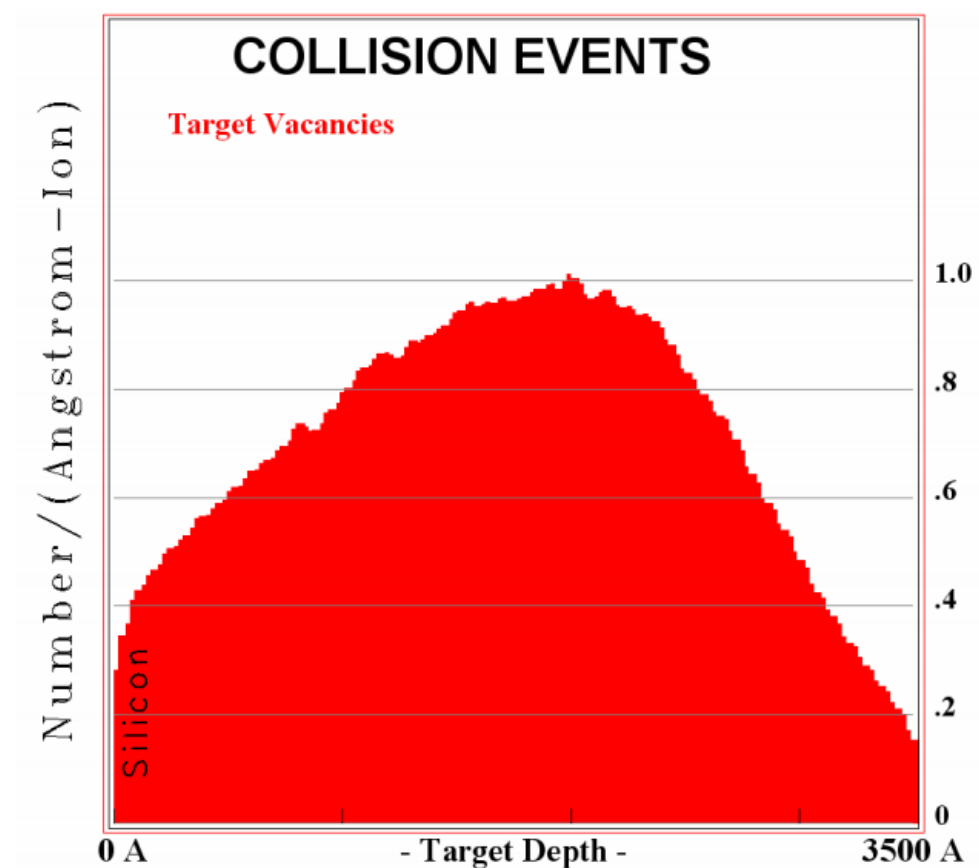
绿色的图展示的是反冲硅原子的分布。这些都是被撞击出它们晶格位置产生空位的硅原子。注意到反冲硅原子（绿色）的分布相比磷离子



有一个更浅的峰。在磷离子径迹的末端附近，离子不具备足够的能量来产生大量的级联损伤。这两个峰具有相同的大小，因而他们对靶造成的损伤几乎等同。

- 这个图像的单位也是 “ $(\text{Atom}/\text{cm}^3) / (\text{Atoms}/\text{cm}^2)$ ”。在反冲硅原子分布的峰附近数值为 10^8 。硅原子的密度大约是 $5 \times 10^{22} \text{ atoms}/\text{cm}^3$ 。稍作计算，你就可以得出，在每平方厘米 5×10^{14} 个磷原子的剂量下，在损伤分布峰处平均每个靶原子就会发生一次移位。这表明晶体靶会非晶化，除非在室温下 99% 的硅晶体损伤会立刻退火导致大部分的损伤会消失。这将在下面进行更详尽的论述。
- 另一张图将帮助你理解这些碰撞的细节。这张名为 “Collision Events” 的图中，靶空位率被作为深度的函数画出（这张图可通过在 TRIM 计算窗口中点击 Damage Events 然后选择 Total Vacancies 来生成）。注意在峰位也是大约每个 \AA 量级的离子产生一个空位，这和之前反冲分布的数字（ $10^8 \text{\AA} = 1 \text{cm}$ ）不谋而合。这个主题将会在教程四中更详细地论述。

注意：如果数据文件中的字符看起来很怪异，那么你的电脑上还未安装 “MS-LineDraw” 字体，这在你继续之前必须完成安装。字体文件已经包含在了 SRIM 软件中，并且已经被放置到路径：C:/WINDOWS/FONTS 之下。可以使用 Windows Explorer 来找到它。选中它然后点击 FILE 和 “INSTALL NEW FONT” 即可。这些指示可能因为不同版本的 Windows 而有所变化。



磷离子会产生一个非晶化层吗？

我们可以估算磷离子是否能产生一个非晶化层。在上面得到的损伤图的峰位处的空位率大约为 1 空位/靶原子。但是我们假设 99% 的损伤都能立刻退火，只剩下 1% 的损伤。利用上面的图像和 10^{15} ions/cm² 的注入剂量可以得到在每 Å² 的体积中可以生成 10^{13} 个稳定的空位。利用 10^8 Å=1cm 进行代换，得到空位密度为 10^{21} /cm³。硅的密度是 5×10^{22} /cm³。计算得到的损伤密度是立方厘米 10^{21} 个空位。因此，硅靶的损伤程度大约为 2%，而注入层并不是非晶化的。这个结论并不是非常准确，因为硅的移位能（将在教程四中讨论）在损伤累积时会减小。这意味着只要有局部的损伤，由于晶格之间耦合得更松散，原子更容易离位，而更多的损伤也更容易生成。这些在晶体中整体性的变化在 TRIM 中并未被考虑，因而损伤可能被低估了。

* 在 **SRIM** 的操作面板上，**Width** 直译应该翻译为“宽度”，但是实际上是指靶的厚度。依照中文的使用习惯，将其翻译作“厚度”。