

二体散乱近似に基づくイオン注入現象

青木正彦

応用物理 2020 年 11 月号に「古くて新しい MARLOWE でイオン注入現象を解析」という記事が掲載され、そこでは MARLOWE コードの簡潔な説明と化合物半導体への適用事例が紹介されました⁽¹⁾。その記事では物理的な背景について触れられていませんでしたので、この記事では衝突理論に基づいて MARLOWE コードがどのような解析を行っているかを紹介します。この記事を通してイオン注入現象に関して理解を深め、さらに新しい材料へのイオン注入を検討する一助になればと思います。今後何回かに分けて興味深い内容を紹介します。

衝突カスケード

イオンがターゲットに入射したときに、どのような衝突現象が起きるかを説明します。入射イオンのエネルギーを E_0 、原子番号を Z_1 とします。ターゲットの原子番号を Z_2 とします。入射イオンがターゲット原子に衝突すると、エネルギーがはじき出しエネルギー E_d よりも高いとターゲット原子は格子サイトからはじき出されます。衝突後の入射イオンのエネルギーを E_1 、はじき出される原子のエネルギーを E_2 とすると以下のような場合分けができます。

$E_1 > E_d$ $E_2 > E_d$: 空孔が発生。

$E_1 < E_d$ $E_2 > E_d$ $Z_1 = Z_2$: 置換現象。

$E_1 < E_d$ $E_2 < E_d$ の場 $Z_1 \neq Z_2$: Z_1 原子は格子間原子。

入射粒子は核との衝突の結果、エネルギーを失い方向を変えます。次の衝突までに直線的に飛行しますが、電子との衝突でエネルギーを失います。最終的にエネルギーが静止エネルギー以下になると停止します。

ターゲット原子が受け取る最大エネルギーは以下の通りです。

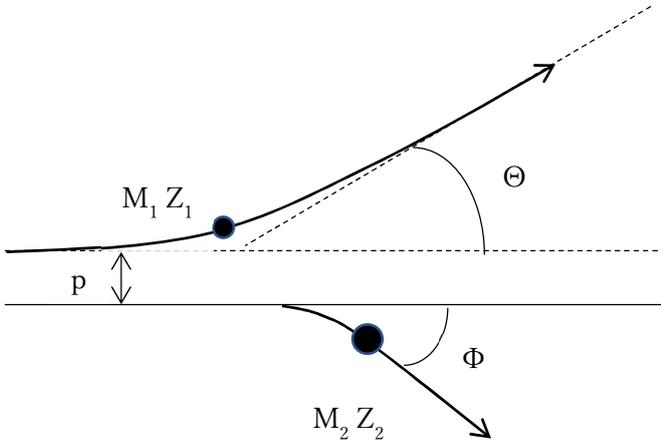
$$E_{max} = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_0$$

例えばシリコンの場合 100keV のエネルギーでボロンを入射すると 80keV のエネルギーをシリコンが受け取るようになります。この値ははじき出しエネルギーよりもはるかに大きいので、次々とはじき出しの連鎖が生じてカスケードとなります。この現象において空孔と格子間原子の対をフレンケル対と呼んでいます。

二体散乱近似

以下の図に示すように、無限遠方から飛来した入射粒子がエネルギー E_0 、衝突係数 p で静止したタ

ターゲット原子と相互作用する場合を考えます。粒子間には二粒子の相対距離によって決まる二体ポテンシャル $V(r)$ による中心力が働くと仮定します。



入射粒子からターゲット原子へのエネルギー輸送は以下の式で表せます。

$$\Delta E = E_0 \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

θ は散乱角で球対称のポテンシャルを仮定すると散乱角は以下の積分で表現されます。

$$\theta(p, E_c) = \pi - 2p \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_c} - \frac{p^2}{r^2}}}$$

この式の p は衝突係数、 E_c は質量中心系のエネルギーです。

$$E_c = E_0 \frac{M_2}{M_1 + M_2}$$

以上より核によるエネルギー損失は以下のように衝突係数 p の積分で求められます。

$$S_n(E) = 2\pi \int_0^{\infty} \Delta E(E, p) p dp$$

原子間ポテンシャル

二つの正電荷の核の間の散乱ポテンシャルは原子核の周りの電子によって遮蔽されています。その電子の影響は遮蔽関数 $\Phi(r)$ であらわされます。

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 q^2}{4\pi\epsilon_0} \Phi(r)$$

Ziegler, Biersack, Littmark は 522 の原子の組み合わせを解析し、universal screening potential を導き出しました⁽²⁾。通常 ZBL ポテンシャルと呼ばれています。イオン注入の分野ではこの ZBL ポテンシャルが使用されています。

$$\Phi(x) = 0.1818e^{-3.2x} + \frac{0.5099e^{0.9423x}}{a_0} + 0.2802e^{-0.4029x} + 0.02817e^{-0.2016x}$$

$$x = \frac{r}{a_U} \quad a_U = 0.8854 \frac{a_0}{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}}$$

ここで a_U は遮蔽距離、 a_0 はボーア半径です。

電子阻止能

電子によるエネルギー損失は衝突係数に依存しない Lindhard 等の LSS 理論⁽³⁾と、衝突係数に依存する Oen-Robinson モデルを組み合わせたものが採用されています。つまり非局所 (non-local) と局所 (local) に分けられます。

$$\Delta E = \Delta E_{nl} + \Delta E_{loc}$$

Non-local は大きな衝突係数の場合に当てはまりますが、Local は個々の衝突に関係します。Non-local のエネルギー損失は以下のように表現されます⁽⁴⁾。

$$\Delta E_{nl} = N S_e \Delta R \left[x_{nl} + x_{loc} \left(1 + \frac{p_{max}}{a} \right) \exp \left(-\frac{p_{max}}{a} \right) \right]$$

ここで ΔR は衝突するまでに粒子が運動する距離、 N はターゲット原子の数密度、 S_e は電子的阻止断面積、 p_{max} は local エネルギー損失が適用される最大衝突係数です。これより大きな衝突係数からの寄与はこの式で扱うこととなります。一方 Local エネルギー損失は以下のとおりです⁽⁴⁾。

$$\Delta E_{loc} = x_{loc} \frac{S_e}{2\pi a^2} \exp \left(-\frac{R(p, E)}{a} \right)$$

$$a = \frac{a_U}{\gamma}$$

$$S_e = k_{corr} k \sqrt{E}$$

γ は実験結果と対応させるためのパラメーターです。Se は Lindhard 等による LSS 理論に基づくエネルギー損失となります。 k_{corr} は実験結果と対応させるためのパラメーターであり、 k は以下のように表現

$$k = 8\pi h a_0 \sqrt{2} \frac{Z_1^{\frac{7}{6}} Z_2}{\left(Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{M_1}}$$

されます⁽³⁾。

Non-local と local の比率は以下の式であらわされます。

$$x_{nl} + x_{loc} = 1$$

$$x_{nl} = y_{nl} E^q$$

シリコンの場合多くの実験データから以下の関係式で値を決めることができます⁽⁵⁾。

例えばシリコンにボロンを注入する場合は、以下の値が提唱されています。

$$k_{corr} = 1.75$$

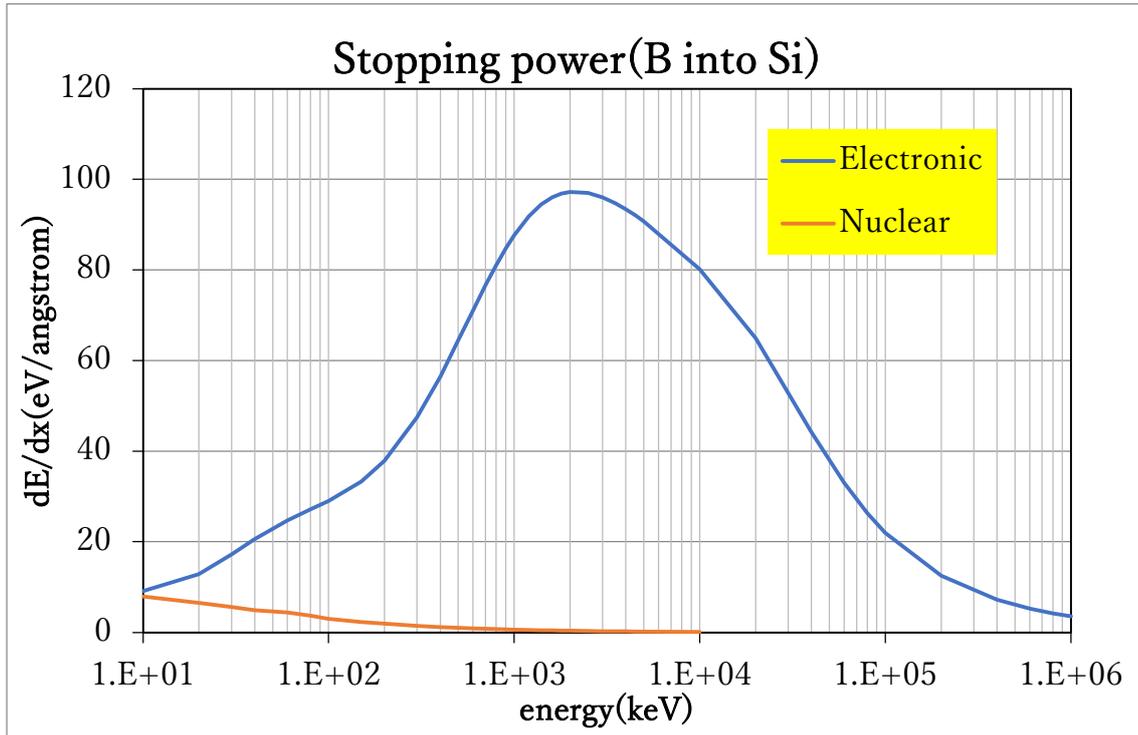
$$y_{nl} = 0.05$$

$$q = 0.23$$

衝突によるエネルギー損失はこれまでに説明した核的損失と電子的損失の和として表現されます。

$$\frac{dE}{dx} = -N[S_n(E) + S_e(E)]$$

シリコンにボロンをイオン注入した場合の核的エネルギー損失と電子的エネルギー損失のエネルギー依存性を示します。



ターゲットの価電子の速度（フェルミ速度）より低いエネルギーの場合はイオン速度の平方根に比例したエネルギー損失を受けます。ボロンの場合は 2 MeV 程度が適用限界となります。これより高いエネルギー領域になると相対論的な考慮が必要となります。

デ바이温度

ターゲット原子の格子振動は入射イオンの軌道に影響を与えます。基板温度が高くなると格子振動によりチャンネルリングが阻害されます。格子原子の熱振動は以下の式で表現されます。

$$f(dx, dy, dz) = \frac{1}{\sqrt[3]{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{dx^2 + dy^2 + dz^2}{2\sigma^2}\right)$$

静止位置からの原子変位の標準偏差はデバイ理論から求められます⁽⁶⁾。

ダメージ

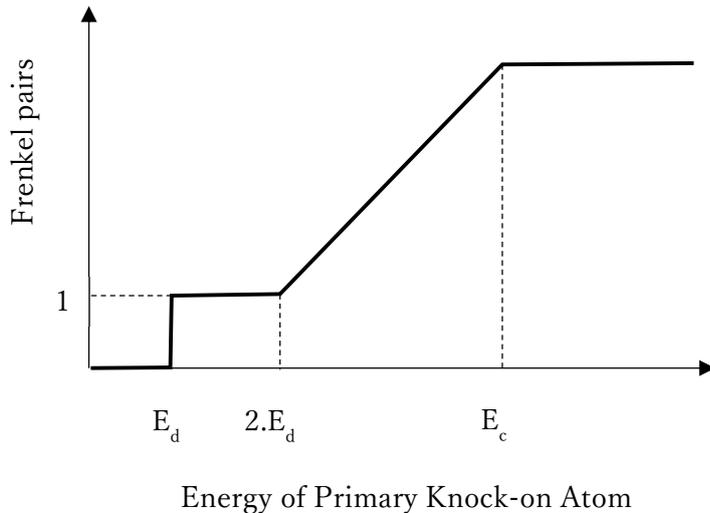
衝突カスケードによって格子サイトから原子がはじき出されて空孔を形成し、はじき出された原子は格子間原子となります。これらをフレンケル対と呼んでいます。フレンケル対の数を見積もるために Kinchin-Pease モデルが提唱されました⁽⁷⁾。このモデルでは衝突は二体散乱と仮定し、エネルギー E_c 以上では核との衝突によるはじき出しは生じないとしています。フレンケル対の数は入射イオンから初期反跳原子(PKA)に与えられたエネルギーの関数と仮定しています。この関数は以下の通りです。

$Frenkel\ pairs = 0\ for\ 0 < T < E_d$

$Frenkel\ pairs = 1\ for\ E_d < T < 2E_d$

$Frenkel\ pairs = \frac{T}{2E_d}\ for\ 2E_d < T < E_c$

$Frenkel\ pairs = \frac{E_c}{2E_d}\ for\ T > E_c$



上記の E_c は核的エネルギー損失と電子的エネルギー損失の境界値となります。 E_c 以下のエネルギーでは核との衝突による弾性散乱によるエネルギー損失が支配的であり、 E_c 以上では電子との衝突による非弾性散乱が支配的になります。

参考文献

- 1) 青木正彦：応用物理、89 卷(2020)11 号
- 2) J. F. Ziegler, J. P. Biersack and U. Littmark :The stopping and ranges of ions in solids (1985)
- 3) J. Lindhard, M. Scharff and H. E. Schiott: Dan. Vidensk. Selsk. Matt. Fys. Medd., v. 33, No.14, p. 1-42(1963)
- 4) M. T. Robinson : Proc. of the Int. Conf. on Computer Simulations of Radiation effects in solids, 141 (1992)
- 5) G. Hobler : N. I. M. V96, 155-162(1995)
- 6) M. Blackman: Handbuch der Physik, Vol. VII, Part 1(Springer-Verlag, 1955)
- 7) G. H. Kinchin and R. S. Pease : Rep. Prog. Phys. 1955, v18, p1-51

お問い合わせ先： 株式会社イオンテクノセンター

URL: <https://iontc.co.jp/>