

チャネリングイオン注入の基礎

青木 正彦

単結晶の特定の結晶軸に沿ってイオン注入を行うと結晶軸に沿って入射イオンが深くまで侵入する現象があり、これをチャネリングイオン注入と呼んでいます。最近化合物半導体デバイスの分野においてチャネリング現象を利用してイオン注入を行う事例が報告されています(1)。この報告によるとシリコンカーバイドを用いたパワーデバイスのへの適用を目指してイオン注入装置を含めて研究開発が進展しています。そこでチャネリング現象を理解しやすくするために入射イオンとターゲット原子との衝突に伴うエネルギー損失などの基礎理論を取り上げました。あわせて MARLOWE による解析結果も紹介して理解を深める情報を提供します(2)。

1. 原子間ポテンシャル
2. 核阻止能
3. 非局所電子阻止能
4. 局所電子阻止能
5. チャネリング注入の事例
6. ターゲット温度の影響

1. 原子間ポテンシャル

入射イオンとターゲット原子の相互作用を説明するための原子間ポテンシャルは、原子核によるクーロン場が内殻電子によって遮蔽される効果を考慮して定義されます(3)。

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right)$$

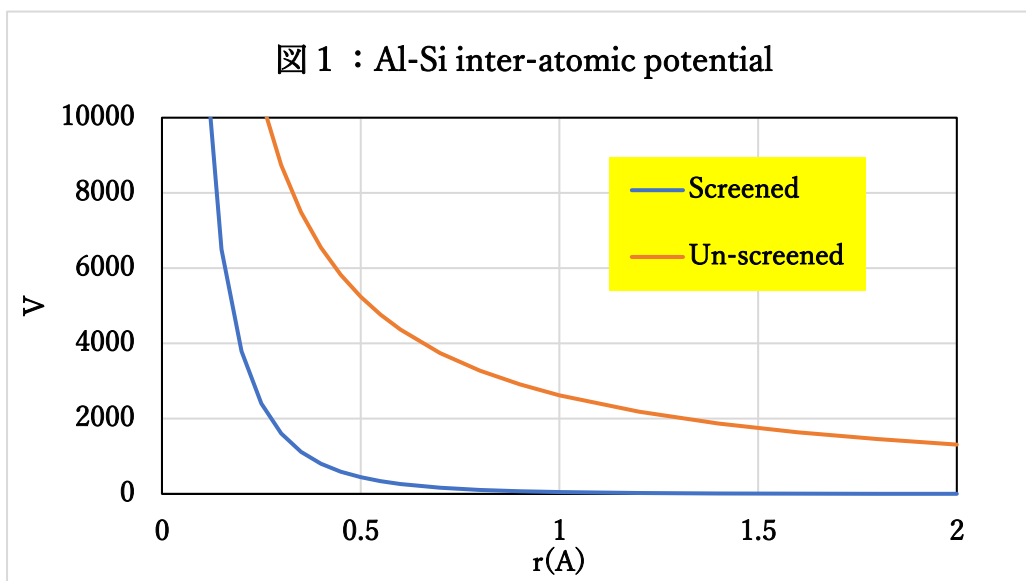
遮蔽関数(Φ)は以下のように定義されます。

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

$$a = \frac{0.8854a_0}{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}}$$

a_0 : Bohr radius

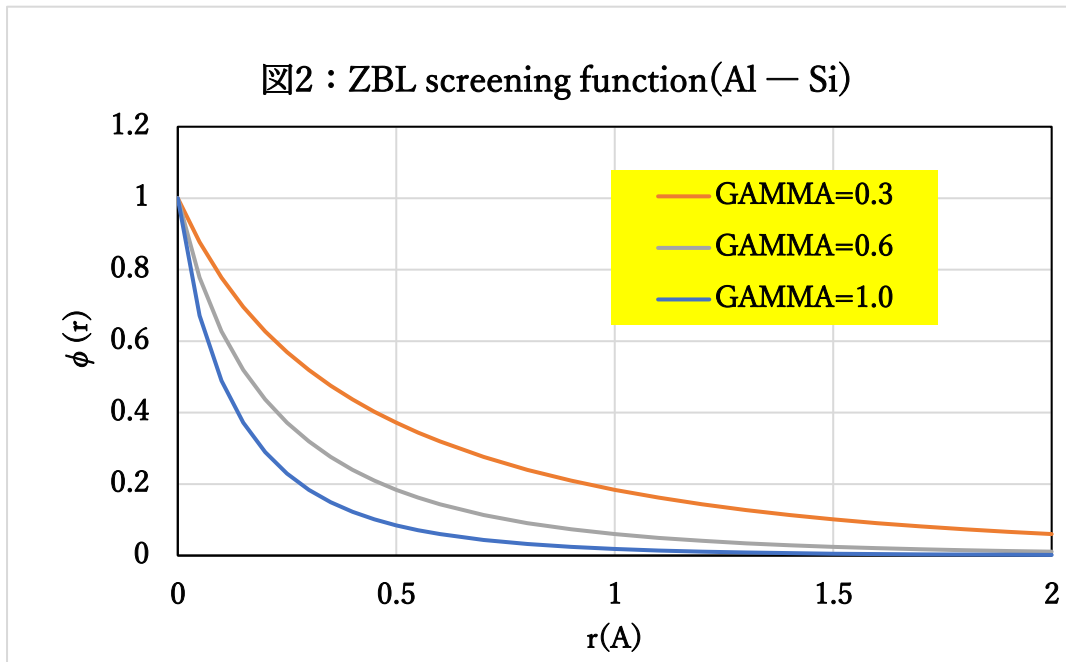
遮蔽関数を考慮した場合としない場合の原子間ポテンシャル分布の違いを図1に示します。



入射原子とターゲット原子のくみあわせの影響を考慮するために遮蔽長は以下のように係数 γ による補正を行います。

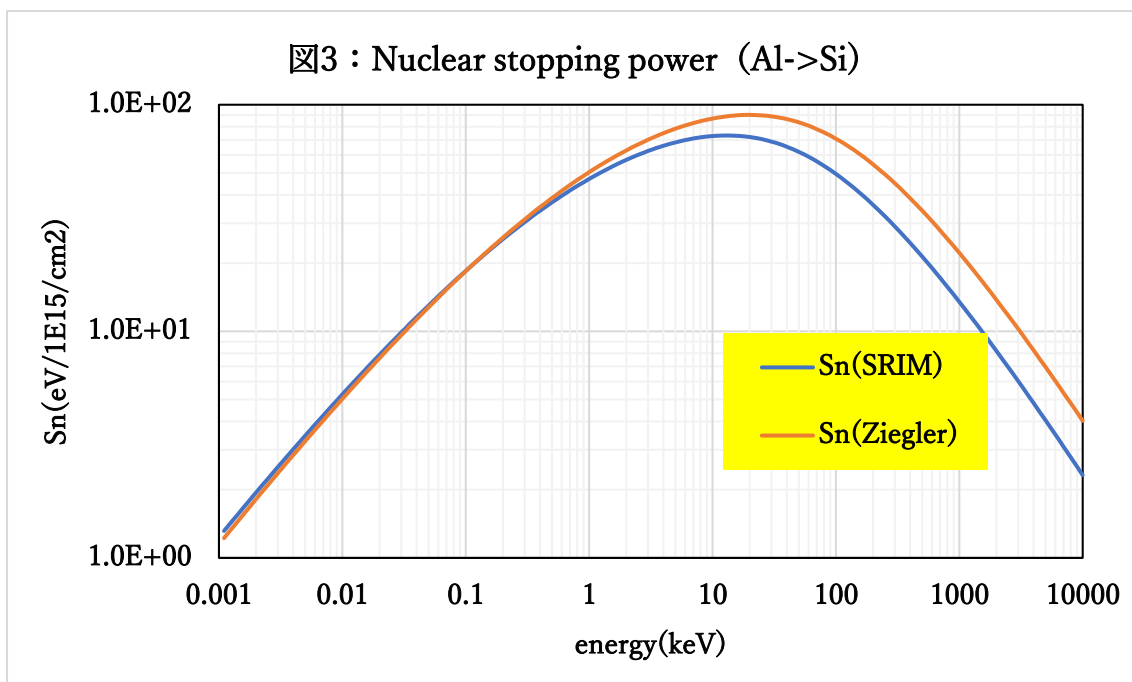
$$\frac{a}{\gamma}$$

補正係数(γ)が 1.0 よりも小さくなると、図 2 に示すようにクーロン場の広がりが大きくなり相互作用領域が大きくなります。その結果エネルギー損失が大きくなると推定されます。つまり入射イオンが深くまで侵入しにくくなることになります。



2. 核阻止能

核との衝突による阻止能はエネルギー依存性があります。Ziegler の解析式による阻止能と SRIM による阻止能を比較した結果を図 3 に示します。広いエネルギー領域で Ziegler の解析式による結果は SRIM と妥当な一致を示しています(4)。



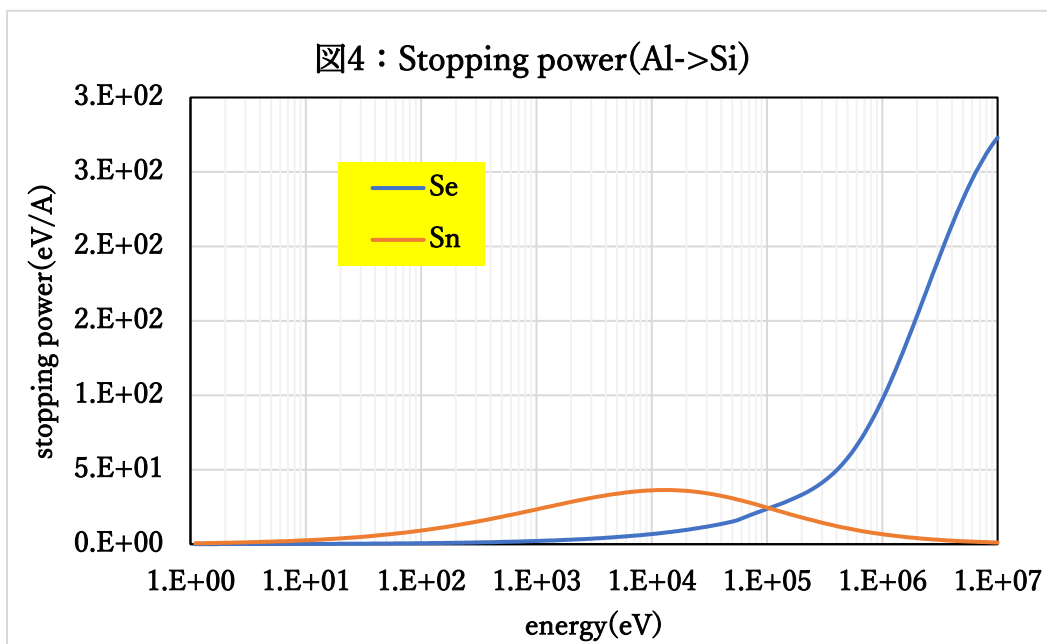
3. 非局所電子阻止能

入射イオンがターゲット原子と衝突する際に、非局所電子阻止能と局所電子阻止能を考慮する必要があります。非局所電子阻止能は入射イオンのエネルギー損失がエネルギーの $\sqrt{}$ に比例するという LSS 理論に基づいて表現されます(5)。

$$S_e = k \times \sqrt{E}$$

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

SRIM によって求められた電子によるエネルギー損失の値(S_e)と核によるエネルギー損失の値(S_n)を図 4 に示します。



LSS 理論による阻止能は古典的な近似です。入射イオンの速度がフェルミ速度を超えると内殻電子が剥ぎ取られる現象が生じるため相対論的效果を考慮したエネルギー損失モデルを採用する必要があります。例えばボロンでは 2.2MeV までが LSS 理論適用可能となり、ヒ素では 194MeV が適用限界エネルギーとなります。さらにこのグラフから 100keV 以下では核阻止能(S_n)が支配的なることが分かります。電子との衝突によってエネルギー損失が生じて最終的に核との衝突によってエネルギーを失い停止することになります。

4. 局所電子阻止能

一方、局所電子阻止能は衝突係数(p)に依存する以下のモデルが報告されています(6)。遮蔽長(a)は係数 γ を用いた形で補正されています。

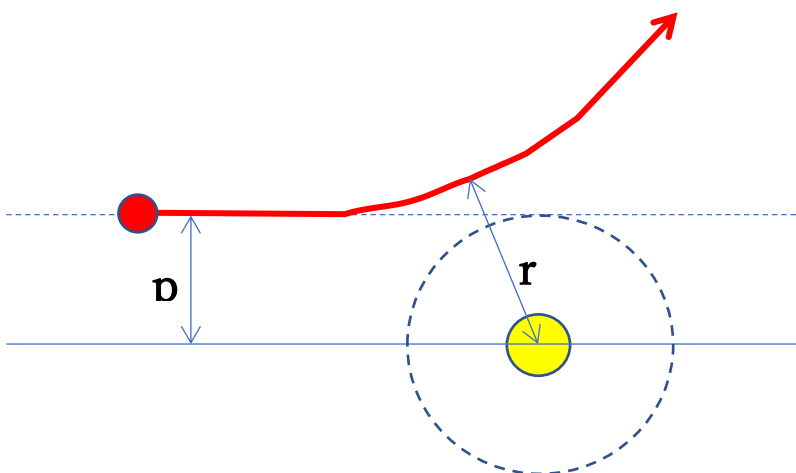
$$Q(p, E) = k\sqrt{E} \frac{1}{2\pi \left(\frac{a}{\gamma}\right)^2} \exp\left(-\frac{r(p, E)}{\left(\frac{a}{\gamma}\right)}\right)$$

ここで k は前項で定義した非局所電子阻止能の値です。さらに $r(p, E)$ は原子間距離を表しています。トータルの電子阻止能は以下のように積分によって求められます。

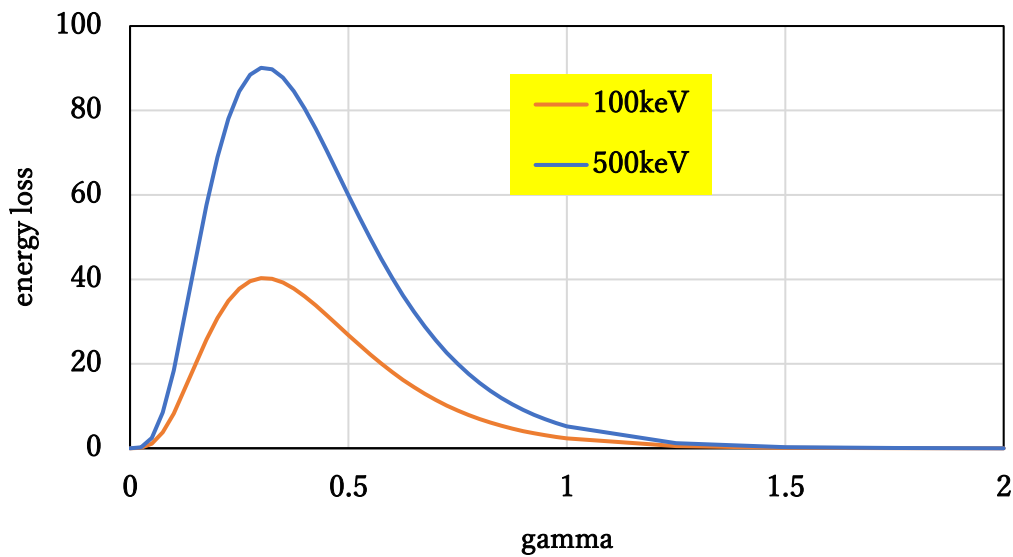
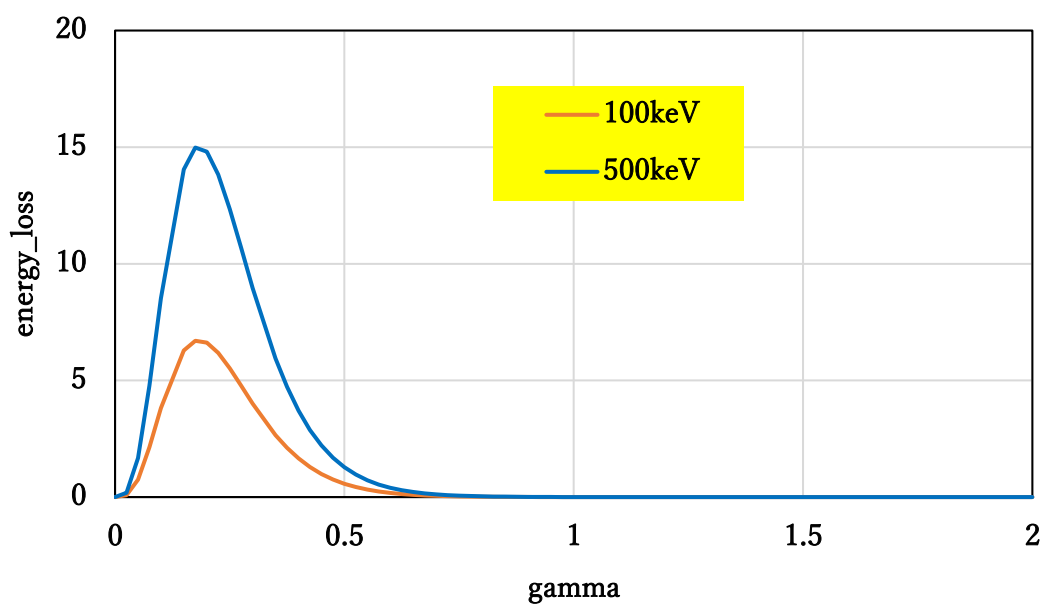
$$S_e(E) = 2\pi \int_0^\infty pQ(p, E)dp = k\sqrt{E}\sigma(\epsilon)$$

衝突係数(p)の意味を説明するために入射イオンとターゲット原子の二体散乱衝突現象を図5で示します。衝突係数(p)が小さいことはターゲット原子に近いところにイオンが入射することを意味します。一方衝突係数が大きいことはターゲット原子位置から遠いところにイオンが入射することを意味します。衝突係数が小さいとターゲット原子から散乱を受けやすく、衝突係数が大きいとターゲット原子からの散乱を受けにくいことになります。

図5 二体散乱の模式図



局所電子阻止能の補正係数の依存性を以下の図6に示します。ある衝突係数(p_1)の場合に補正係数(γ)の値が大きくなることによってエネルギー損失が大きくなることがわかります。さらに入射イオンのエネルギーが大きくなるとエネルギー損失が大きくなることも反映されています。

図6 : Energy loss vs. gamma (impact parameter: $p=p_1$)図7 : Energy loss vs. gamma (impact parameter: $p=p_2 > p_1$)

一方衝突

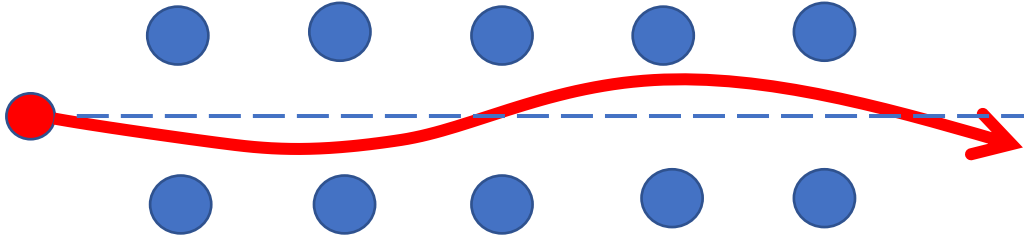
係数(p_2)が p_1 よりも大きくなるとターゲット原子との距離が遠くなり、相互作用が弱くなるため図 7 のようにエネルギー損失が小さくなります。

このように入射イオンが結晶軸のどこを通過するかによってエネルギー損失が異なる、つまりイオンの侵入深さが異なることを説明することができます。このことはチャネリング注入の本質となります。さらに図 6 と図 7 のグラフから γ の値はエネルギー損失に大きな影響を与えることが分かります。つまり γ の値の最適化がチャネリング現象を正しく再現できるかどうかのカギとなります。

5. チャネリング注入の事例

チャネリング注入に影響を与えるのが結晶軸からイオン入射方向がずれることです。図 8 に示すようにある角度以上ずれてターゲットに入射すると格子位置の原子との衝突を繰り返してエネルギーを損失し、深い位置まで侵入しなくなります。

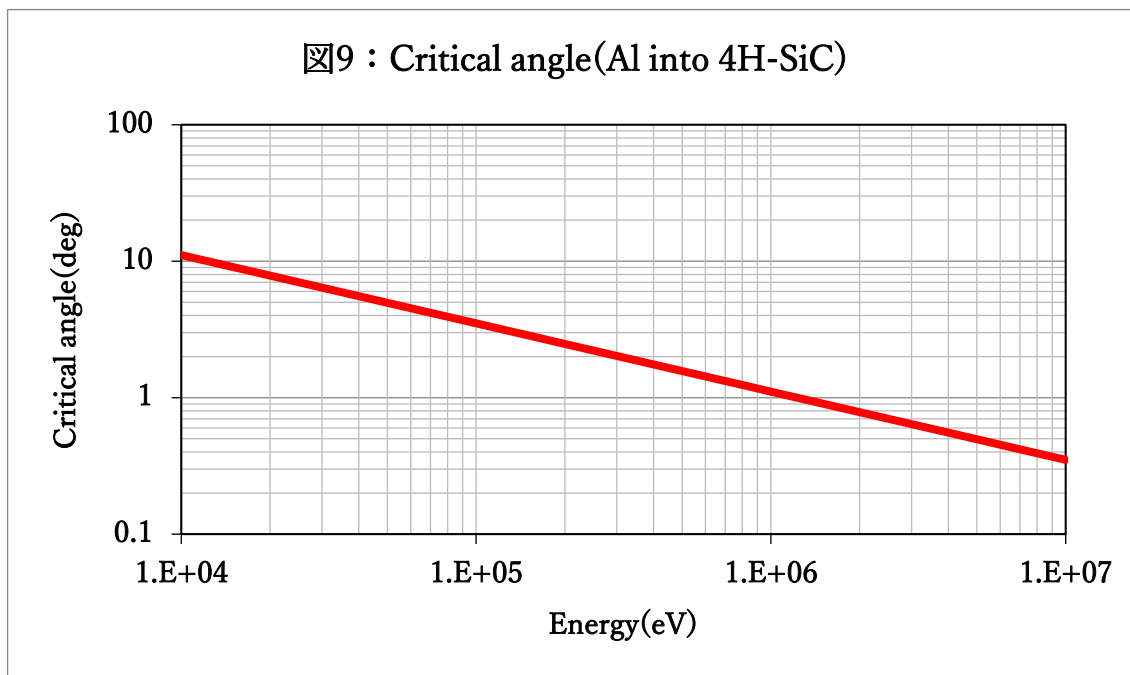
図 8



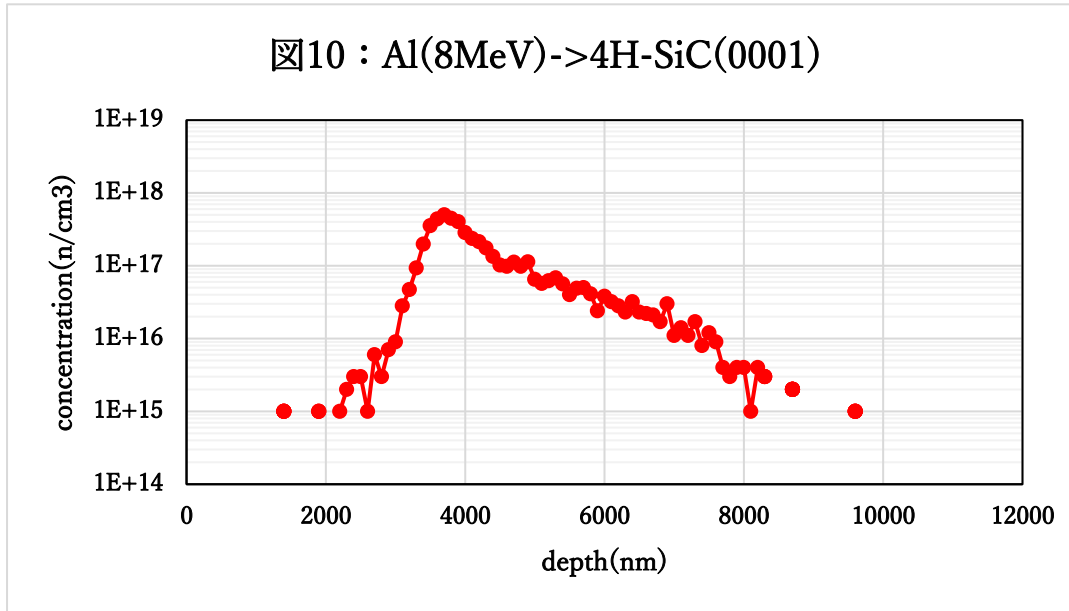
この角度つまりチャネリング臨界角度が定式化されており、以下の式で表されます(7)。

$$\theta_{critical} \propto \sqrt{\frac{Z_1 Z_2 e^2}{E d_{row}}}$$

ここで d_{row} はイオン入射方向の格子面間隔を表しています。図 9 に示す通り入射エネルギー(E)が高くなるほど臨界角が小さくなり、結晶軸とのわずかなずれがチャネリングに影響を与えることとなります。



チャネリング注入の例として、高エネルギーチャネリング注入を取り上げます。8MeV のアルミイオンを 4H-SiC のc軸に沿って注入した場合のシミュレーションによって得られたプロファイルを図 10 に示します。すそ野は 8 ミクロン程度まで広がっています。このシミュレーション結果は実際にチャネリング注入の SIMS 結果ともよい一致が見られました。



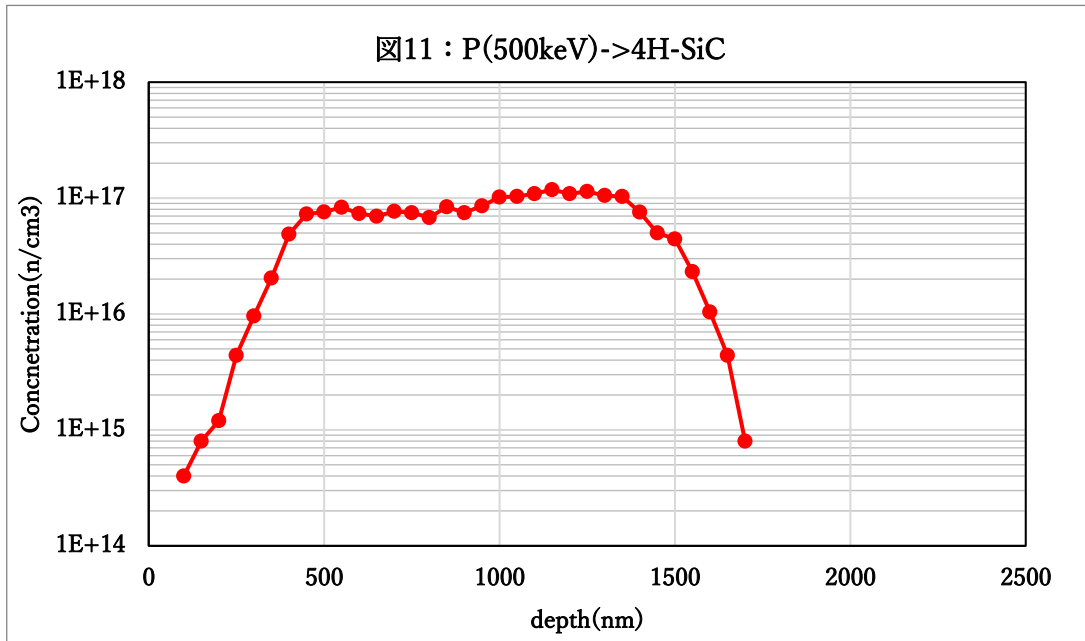
さきほどのチャネリング臨界面積のグラフからイオン入射角度が 0.3 度以上傾くとチャネリング現象が阻害されることとなります。つまりウェファを設置する機構に関して高い機械的精度が求められます。従来のイオン注入装置ではウェファの傾きの精度は±0.5 度程度です。最新のイオン注入装置では±0.1 度の精度で制御できることが報告されています。

8 ミクロンの侵入を実現するためにチャネリング条件を使用しない場合は 30MeV 程度の高エネルギー注入が必要になります。つまりサイクロトロンなどの複雑で巨大なイオン注入装置が必要になります。しかしチャネリング注入を採用すると通常のプロセスで使用されるイオン注入装置で対応可能となります。

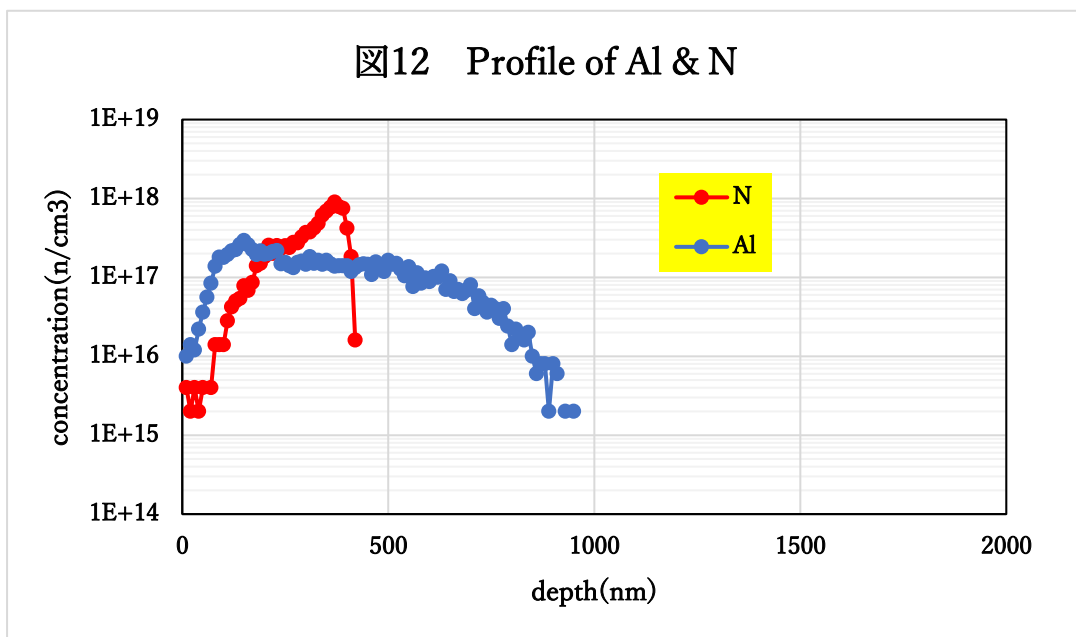
さらに通常のイオン注入プロセスで採用されているランダム注入ではターゲット原子との衝突頻度が多くなりターゲット原子の欠陥が増加します。しかしチャネリング軸に沿ってイオンが侵入するとターゲット原子との衝突頻度が抑制され、基板のイオン注入による欠陥が少なくなります。このため欠陥の少ない数ミクロン程度の深いドーパントの分布を実現できる可能性があります。さらにイオン注入エネルギーが低く抑えられるため、マスクの厚さを薄くすることが可能になるなどのメリットが挙げられます。この技術を利用してパワーデバイスにおいて深い注入プロファイルを用いたスーパージャンクション構造を適用する MOSFET の研究が進んでいます(8)。

現在の課題は注入ドーズ量が高くなると入射イオンによる欠陥が多くなりチャネリングが阻害されるようになることです。これまで報告されている結果からチャネリングが阻害され始める臨界ドーズ量が存在すると推定しています。このドーズ量以下であれば入射イオンが深くまで侵入するプロファイルを得ることができます。

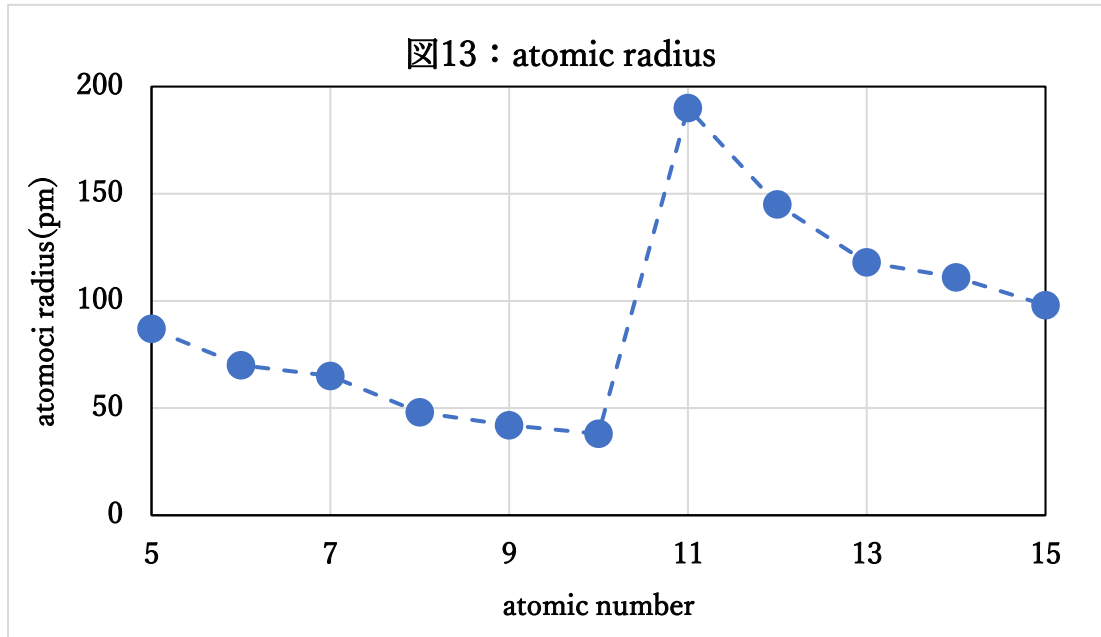
図 11には 500keV のリンを4H-SiC にチャネリング注入した解析結果を示します。1.5 ミクロン程度までPが侵入していることが分かります。



エネルギーが 100keV の4H-SiC へのアルミニウムと窒素イオンチャネリング注入のシミュレーション結果を図 12 に示します。アルミニウムイオンの場合とプロファイル形状が異なっています。また入射イオンの侵入深さも浅くなっています。

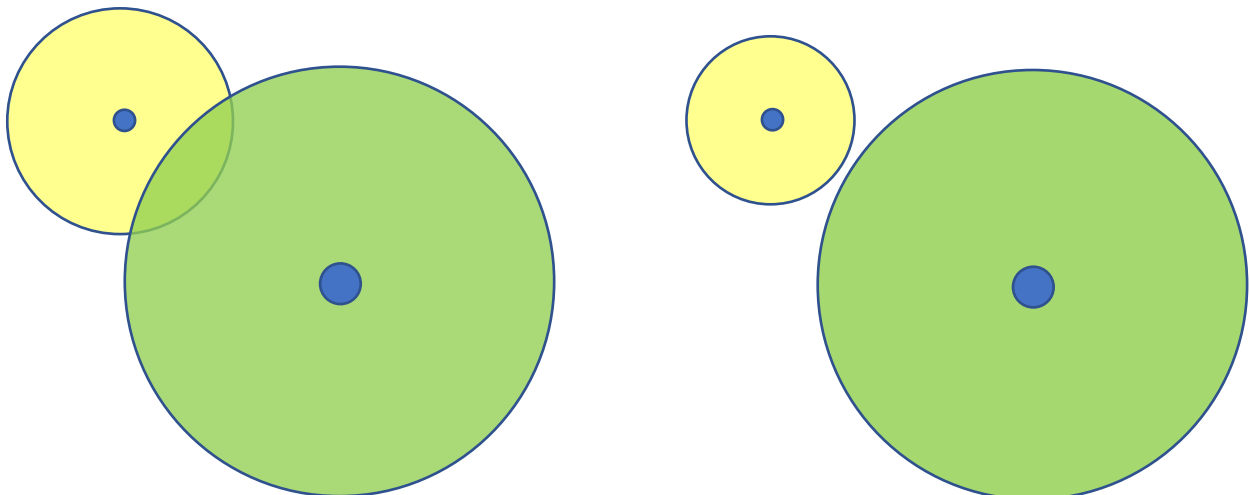


この理由として挙げられるのは窒素イオンとアルミニウムイオンの原子半径の違いの影響があります。図 13 に原子半径の原子番号依存性を示します。アルミニウム($Z=13$)やリン($Z=15$)は100pm以上の原子半径ですが、窒素($Z=7$)は 60pm 程度となります。この原子半径の違いが注入プロファイルに関係していると考えられます。実際この原子半径の違いを考慮してエネルギー損失のモデルを変更することによって窒素イオンの注入プロファイルを再現することができました。



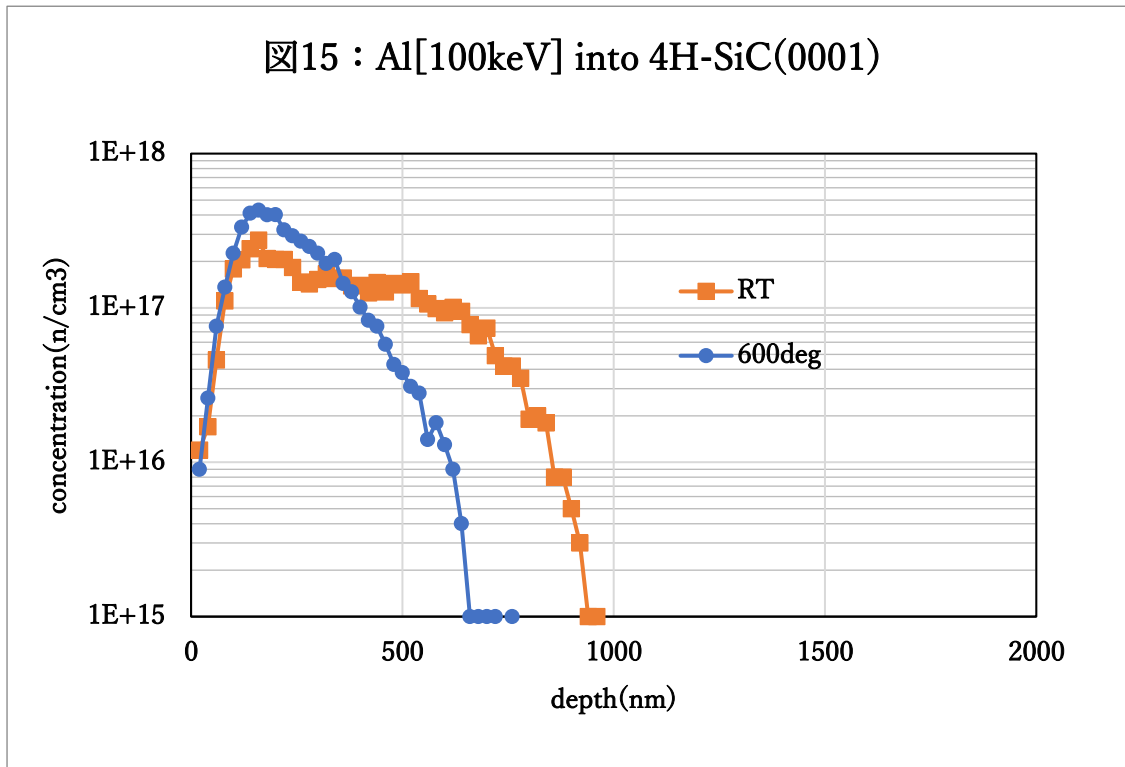
入射イオンの原子半径が衝突現象に影響を与える状態を模式的に図 14 に示します。黄色で表示する入射イオンの内殻電子の配列に基づく原子半径が小さくなると緑色で表示するターゲット原子の原子半径との関係から相互作用が弱くなり、局所的なエネルギー損失よりも非局所的なエネルギー損失が支配的になります。つまり窒素の場合はアルミニウムやリンとは異なる衝突モデルを採用する必要があると考えられます。

図 14: 原子半径の異なる原子との衝突



6. ターゲット温度の影響

SiC の場合には結晶性回復のために高温で注入することがあります。ターゲット温度を変えた場合に入射イオンのプロファイルがどのように変化するかを図 15 に示します。ターゲット温度の上昇によって格子振動振幅が大きくなりチャネリングが阻害されます。その結果プロファイルは表面側にシフトします。現状のシミュレーションでは原子のマイグレーションまで考慮できないため、高温注入による欠陥回復を考慮するには新たな解析手段が必要になります。



参考文献

- (1) R. Wada, et. al , JJAP, 61,SC1033(2022)
- (2) 青木正彦、応用物理、11月号、P675(2020)
- (3) J. F. Ziegler, J. P. Biersack and U. Littmark, The stopping and ranges of ions in solids (1985)
- (4) J. F. Ziegler, J. P. Biersack and U. Littmark , The stopping and ranges of ions in solids (1985)
- (5) J. Lindhard, M. Scharff and H. E. Schiott: Dan. Vidensk. Selsk. Medd., v. 33, No.14, p. 1-42(1963)
- (6) M. T. Robinson , Proc. of the Int. Conf. on Computer Simulations of Radiation effects in solids, 141 (1992)
- (7) K. Nordlund, et.al, P. R. B, 94, 214109(2016)
- (8) PCT/US2017/022240