

二体散乱モデルによるイオン注入現象解析の課題

青木 正彦

これまでのイオン注入の解説記事では化合物半導体に特化した内容を紹介してきました。今回は基本的なシリコンへのチャネリング注入の解析に関する基礎的な事柄を紹介してこれまでの解説記事の復習を行います。そして一般的に使用されているイオン注入現象の解析コードの課題についても触れています。

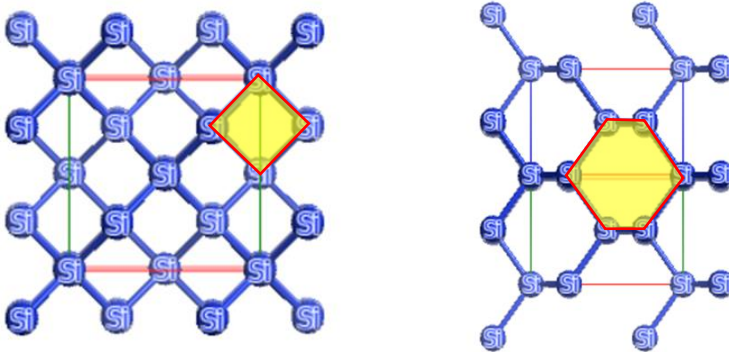
今回は以下の内容について説明しています。

1. シリコンへのチャネリング注入プロファイル
2. 阻止能
3. 今後の課題

1. シリコンへのチャネリング注入プロファイル

シリコンの結晶はダイヤモンド構造です。(001)面と(110)面から見たシリコン原子の配列を図 1 に示します(1)。水平軸は a 軸を表しています。つまり左の図は[001]の軸に沿ったチャネリング注入に相当します。右の図は(110)面から見たシリコン原子の配列を表示しています。

図 1:シリコン結晶構造[左:(100) 右:(110)]



これまでの解説記事の復習になりますが、ボロンをシリコンにイオン注入した場合の解析の概要を説明します。チャネリング注入された入射イオンの深さ分布を予測するためには電子的阻止能のモデルが重要な要素となります。ターゲットにおける入射イオンの飛行距離に比例する非局所(non-local)電子的阻止能と衝突係数に依存する局所(local)電子的阻止能のモデルが提案されています。非局所電子的阻止能は次の式で表現されます。

$$\Delta E^{nl} = x^{nl} N S_e L$$

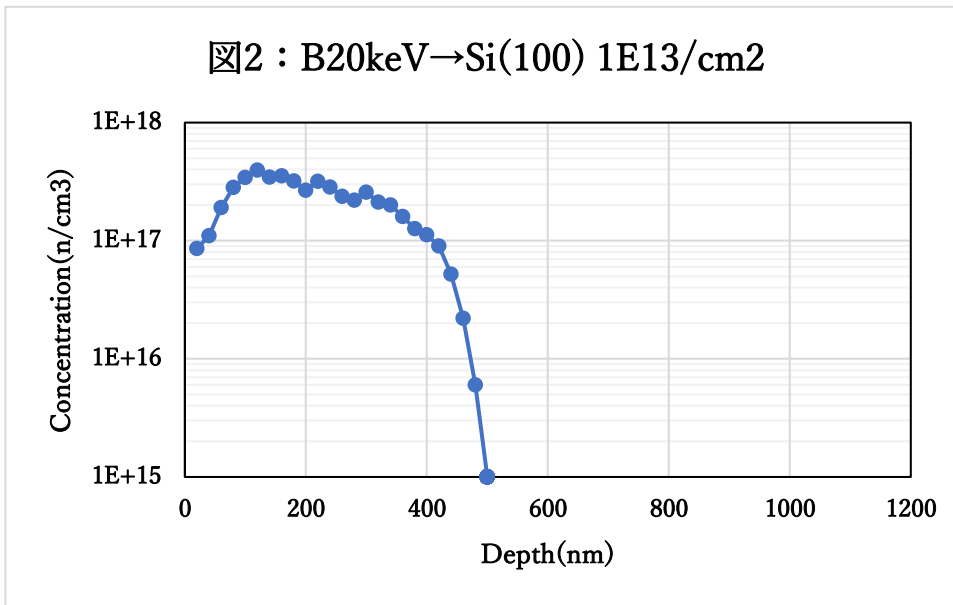
N はターゲットの原子密度、 x^{nl} は非局所電子的阻止能の割合、そして S_e はランダム入射の電子的阻止能を表しています(2)。

一方、局所電子的阻止能は以下のような衝突係数に依存する Oen-Robinson モデルが採用されています(3)。

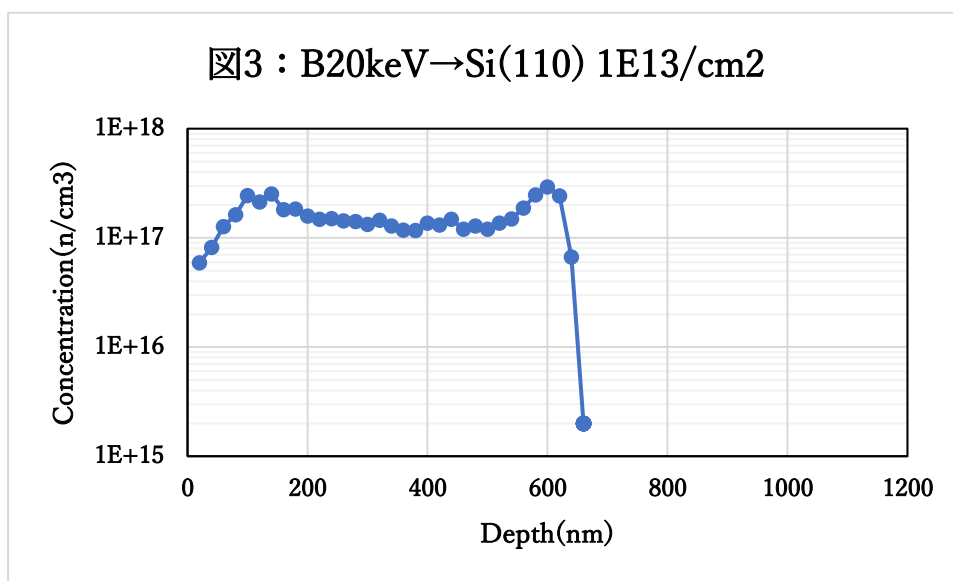
$$\Delta E^{loc} = (1 - x^{nl}) \frac{S_e}{2\pi a^2} \exp\left(-\frac{p}{a}\right)$$

ここで p は衝突係数、 a は遮蔽長を表します。

ランダム注入の場合は非局所電子的阻止能の割合と遮蔽長には依存しないことが知られています。しかし、これまでの報告によると(100)面と(110)面へのチャネリング注入の解析結果と SIMS の結果を対応させるために非局所電子的阻止能の割合と遮蔽長の値を調整することが必要でした(4)。さらにシリコンの格子振動と関係するデバイ温度の値も最適な値に設定する必要があります。最適な値を選択することによってチャネリング注入のプロファイル再現性が向上したことが報告されています(5)。論文に公開されている 20keV のボロンイオンを Si(100)にチャネリング注入した場合の SIMS 結果と対応する解析結果を図 2 に紹介します。

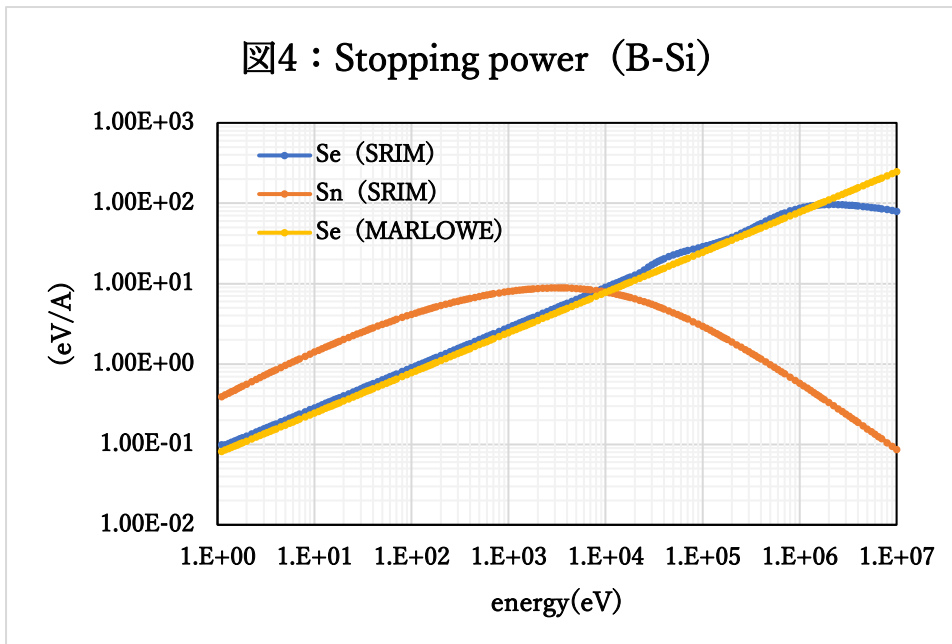


一方(110)面へのチャネリング注入では図 3 に示すように(100)面に比べると深くまでボロンが侵入していることがわかります。この結果は(110)面は(100)面に比べてシリコン原子の配列において空隙が広いことに起因しています。



2. 阻止能

SRIM によって求められたボロンをシリコンに注入した場合の電子的阻止能と核的阻止能のグラフを図 4 に示します。入射エネルギーが 10keV 以上では電子的阻止能が支配的になることがわかります。SRIM によって求められた電子的阻止能の値と MARLOWE によって求められた電子的阻止能の値は入射エネルギーが 2MeV 程度まで係数をかけることによって一致させることが可能です。



つまりこのエネルギーまでは電子的阻止能が入射エネルギーの平方根(速度)に比例するという古典的な LSS 理論で説明ができます。しかし入射エネルギーが 2MeV 以上になると入射エネルギーに反比例して阻止能が減少するモデル(Bethe-Bloch)が必要になります。一般的に入射イオンの速度を V とすると $V \gg Z^{2/3} \times v_0$ の領域では阻止能が V^{-2} に比例します。一方 $V \ll Z^{2/3} \times v_0$ の領域では阻止能は V に比例します。ここでボーア速度を v_0 としています。

3. 今後の課題

先ほど説明したように基本的に古典的なLSS理論で二体散乱を記述することができますが、実際には限界があります。イオン衝突の分野では入射イオンの原子番号によって電子的阻止能が変化する現象が知られています。この現象を Z_1 振動と呼んでいます(6)。図 5 に示すように原子番号 Z_1 に対してLSS理論によって求められる電子的阻止能とSRIMによって求められた電子的阻止能を比較しています。ターゲットはシリコン原子を想定しています。

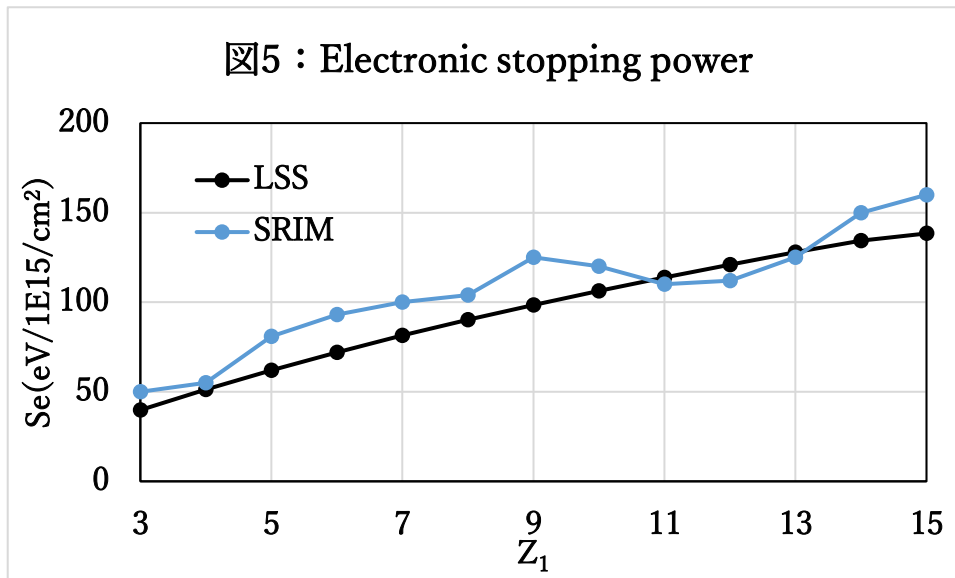


図 5 から明らかに電子的阻止能が原子番号の増加に伴って振動していることがわかります。LSS理論ではこの現象を再現することができません。そこで新たに衝突モデルを構築して電子的阻止能の原子番号依存性を説明することが行われてきました(7)。例えば電子的阻止能のモデルとして次の式が提唱されてきました。

$$S_{non-local} = \int [Z_1^*(v, r_s^0)]^2 S_p(v, r_s) dx$$

Z₁*:イオンの有効電荷

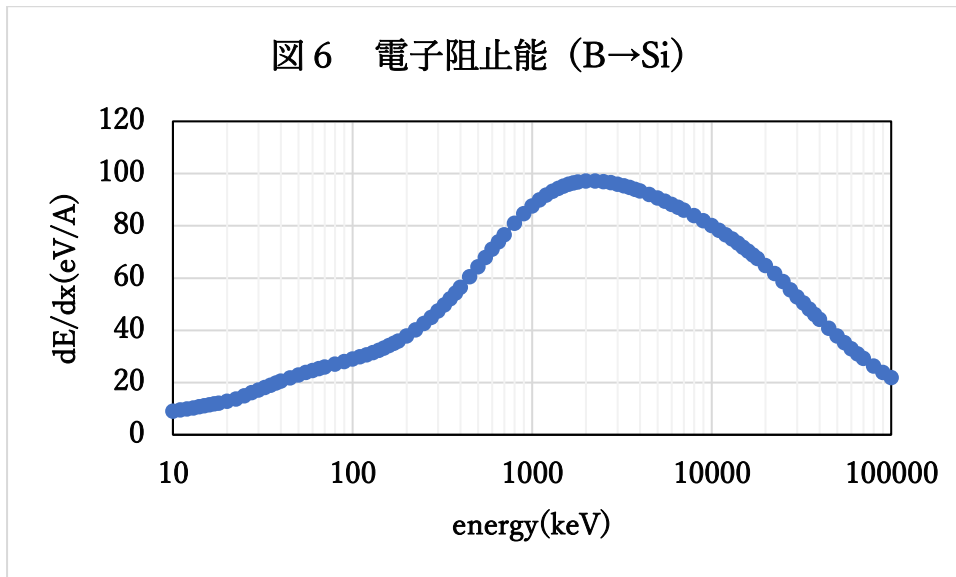
S_p:プロトンの電子的阻止能

r_s :電子半径

v :入射イオン速度

このモデルではイオンの軌道を追跡しながら電子的阻止能を計算する必要があり膨大な計算時間を要することが報告されています。

そこでSRIMの電子阻止能データベースをインポートしてより現実的な計算時間で解析を行っているグループもあります(8)。彼らは SRIM から求められる入射イオンとターゲットの組み合わせによる阻止能のデータをカーブフィッティングすることによって任意のエネルギーにおける電子的阻止能を求めています。図 6 に B イオンを Si に入射した場合の電子的阻止能のエネルギー依存性を示します。3000keV 以上のエネルギーでは阻止能の値がエネルギーと共に低下していることが分かります。この傾向はセクション2で説明したとおりです。



このように汎用的なイオン注入シミュレーションを行うためには電子的阻止能をいかに正確に扱えるかがポイントになります。今後この課題を解決するためにプログラムの更新も視野に入れて検討を進めていくことが必要です。

LSS理論の補足説明

入射イオンとターゲット原子の衝突系において電子的阻止能には速度スケール則が成立し、核的阻止能にはエネルギースケール則が成立すると仮定する理論です。この理論を提唱した研究者の名前 (Lindhard-Sharff-Shiott)の頭文字を用いてLSS理論と名前が付けられています。この二つの阻止能を分離して原子衝突を解析できると仮定しています。

参考文献

- (1) <https://jp-minerals.org/vesta/jp/>
- (2) J. F. Ziegler, J. P. Biersack and U. Littmark, The stopping and ranges of ions in solids (1985)
- (3) O. S. Oen, M. T. Robinson, Nucl. Instrum. Methods 174 (1980)257
- (4) G. Hobler, H. Potzl, Mater. Res. Soc. Proc. 279 (1993) 165
- (5) A. Dygo, P. J. M. Smulders, D. O. Boerma, Nucl. Instrum. Methods B64 (1992) 701
- (6) P. F. P. Fichtner, et. al., Nucl. Instrum. Methods. Vol. 15, Issue 1-6 (1986) 58
- (7) J. M. Hernandez-Mangas, et. al., JAP Vol.91, No.2 (2002) 658
- (8) C. J. Ortiz, et. al., Radiation effects & defects in solids (2014)