

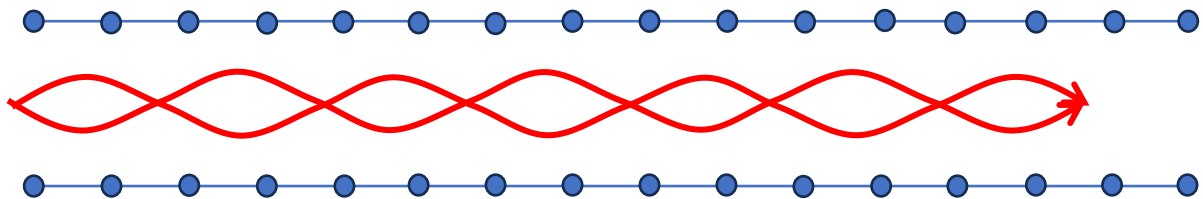
チャネリングイオン注入の臨界角度に関する基礎

青木 正彦

初めに

これまでの数年間、チャネリングイオン注入に関する現象を MARLOWE コードによって解析してきました。主に化合物半導体である4H-SiC や GaN に関するチャネリング現象について SIMS プロファイルとの照合に取り組んできました。この記事ではチャネリング現象の基本的な事柄である臨界角度についてまとめた内容を解説します。

簡単にチャネリング現象について下の図を用いて復習しておきます。イオンが結晶軸に平行に近い角度で入射したときに、結晶軸周りのポテンシャルにとらえられて進行することをチャネリングと称します。理想的には結晶軸に入射したイオンははるか彼方まで侵入することになります。結晶軸への入射角度が大きくなるとチャネリングが阻害されることが容易に推察できます。

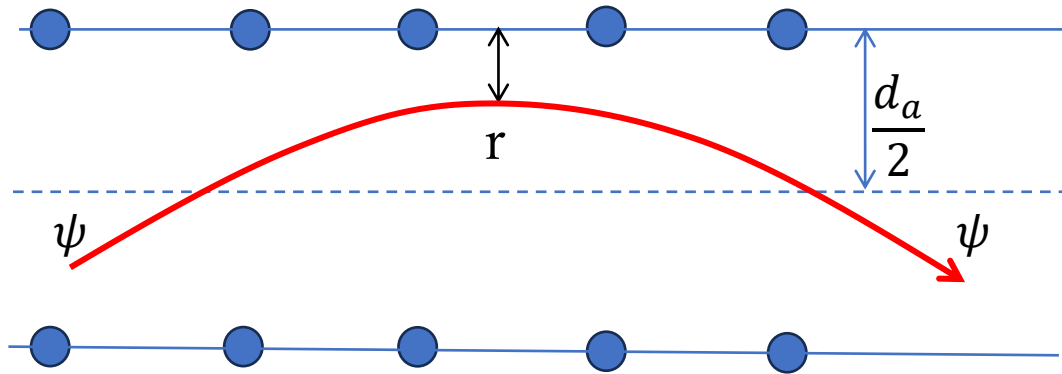


半導体への深い注入を実現するためにチャネリングが適用されるのは周知の事実です。しかし素粒子物理の分野で GeV オーダーの超高エネルギービームを湾曲した結晶に通過させて偏向させる技術が開発されていますが、ここにもチャネリング現象が応用されており、詳細な解析が行われて実地的なモデルが提唱されてきました。この記事ではチャネリング現象の関係する臨界角度の概念を可能な限り図で説明し、数式は最小限に抑えましたので最後まで目を通していただけたら理解の助けになると思います。

臨界角度の定義

チャネリング注入ではターゲットの結晶軸に沿ってイオンを入射する必要があります。しかし入射角度の傾きによってチャネリングが阻害されますが、入射角度の傾きがどれほど許容されるかを評価するために臨界角度が定義されます。

チャネリング現象の模式図



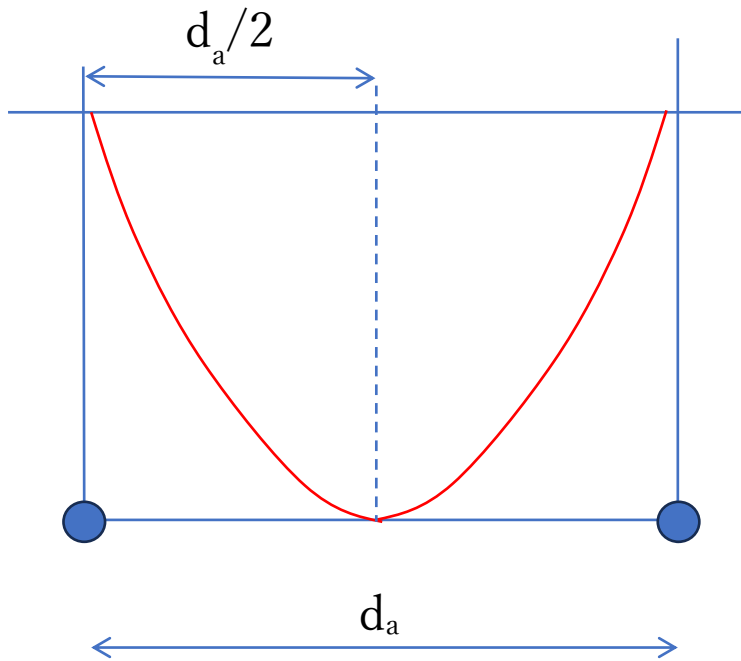
チャネリング現象の模式図から、結晶軸に沿って ψ の角度で入射したイオンは r の位置で結晶軸のポテンシャルによって反射されます。この位置ではイオンの進行方向に垂直な方向の運動エネルギーはゼロとなります。しかし任意の位置での垂直方向の運動エネルギーは以下ようになります。

$$E \sin^2 \psi$$

チャネリング注入の場合は入射角が微小であるためサイン関数の近似を適用することができます。さらに運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの和の保存則からイオンの進行方向と垂直方向について以下の式が成り立ちます。なおポテンシャルエネルギーの最小値は結晶軸の中間位置として定義しています。

$$E_{\perp} = U(r) = E \psi^2 + U\left(\frac{d_a}{2}\right)$$

入射イオンが感じるポテンシャルの模式図を以下に示します。イオンの進行方向から見たポテンシャルは結晶軸に近づくにしたがって大きくなります。



イオンの入射角度を大きくすると結晶軸に最も近づく最近接距離の位置(r_c)に到達します。この入射角度をチャネリングが生じる最大角度(ψ_{max})と定義します。

$$E_{\perp} = U(r_c) = E \psi_{max}^2 + U\left(\frac{d_a}{2}\right)$$

ポテンシャルの分布図からポテンシャルエネルギーは以下の関係を満たします。

$$U(r) < U(r_c)$$

チャネリングが生じる最大角度以上の角度でイオンが入射するとチャネリングが阻害されることとなります。従って臨界角度は以下のように求められます。

$$\psi_{max} = \sqrt{\frac{U(r_c) - U\left(\frac{d_a}{2}\right)}{E}}$$

原子間ポテンシャル

次にイオンが感じるポテンシャルを求めます。原子間ポテンシャルは一般的に以下の式で表現されます。

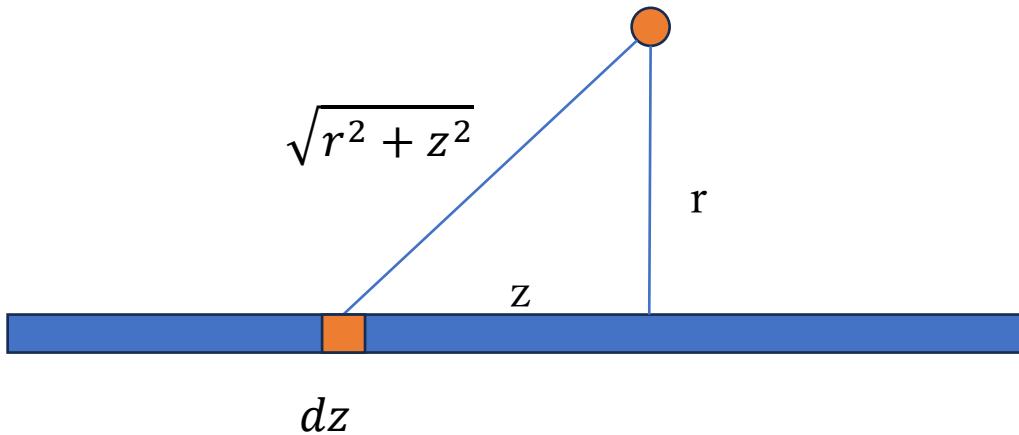
ここで Z_1 は入射イオンの原子番号、 Z_2 はターゲット原子の原子番号、 r は入射イオンとターゲット原子の距離を表します。関数 g はスクリーニング関数として定義され、ポテンシャルの形によって異なります。さらにパラメータ a はスクリーニング長としていくつかの表現が提案されていますが、基本的には入射イオンとターゲット原子の原子番号の関数となります。。

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

$$a \propto \frac{a_0}{\sqrt{Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}}}$$

$$g(r) = \sum_1^3 \alpha_i \exp\left(\frac{r \beta_i}{a}\right)$$

入射イオンが感じる平均的なポテンシャルは距離 r だけ離れた個々の原子からのポテンシャルの和によって求められます。結晶軸が電荷の連続体と仮定すると、原子間隔 d に一様に電荷が分布すると仮定し、 dz における電荷と入射イオンとの配置は以下の図に示すようになります。



連続体ポテンシャルは以下のとおり結晶軸の $-\infty$ から ∞ までの積分によって求められます。

$$U_{ax}(r) = \frac{1}{d} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dz \sum_{j=-\infty}^{j=\infty} U\left(\sqrt{r^2 + (z - j d)^2}\right) = \frac{1}{d} \int_{-\infty}^{\infty} U\left(\sqrt{r^2 + z^2}\right) dz$$

この式の積分を解析的に解くと以下の式で表現できます。

$$U_{ax}(r) = \frac{2 Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 d} f\left(\frac{r}{a}\right)$$

$$f(\xi) = \sum_{i=1}^3 \alpha_i K_0(\beta_i \xi)$$

関数 K_0 はゼロ次のベッセル関数となります。

最近接距離

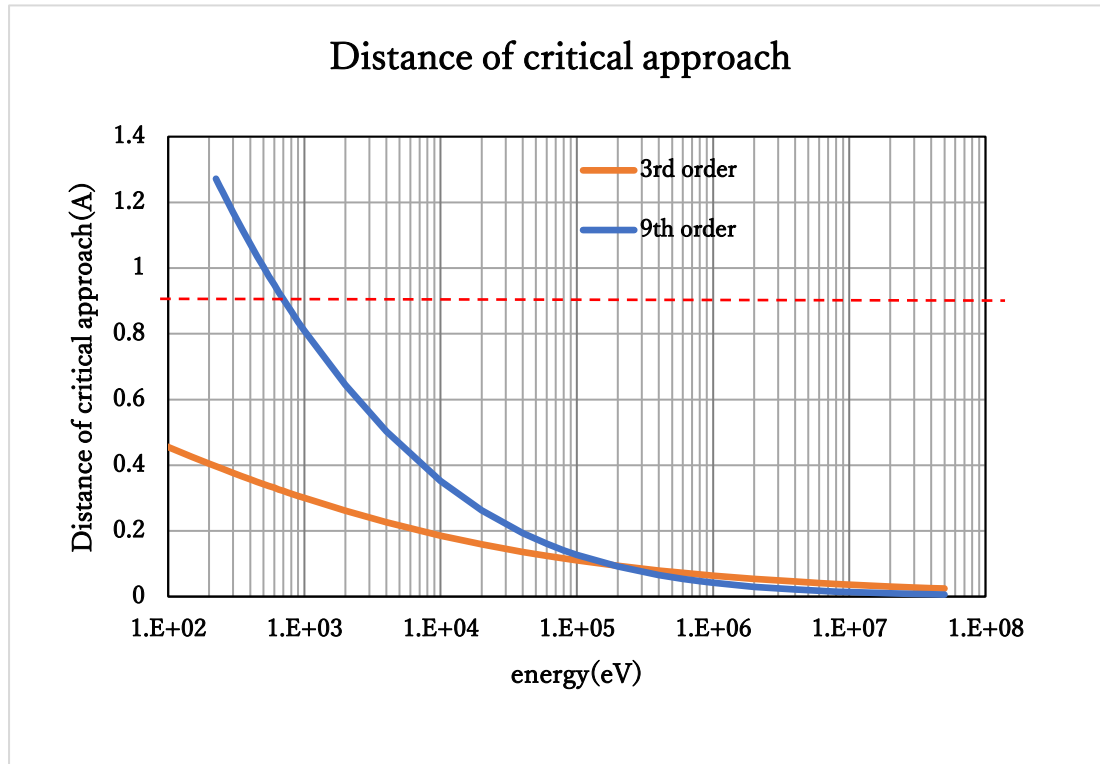
次に最近接距離について説明します。最近接距離を求めるために入射エネルギーEの逆数に比例するパラメータ α の平方根を用いて3次の近似式が提案されていました。

$$r_c = \frac{2}{3} a \sqrt{\alpha} \left[1 - \frac{\sqrt{\alpha}}{19} + \frac{\alpha}{700} \right]$$

$$\alpha = \frac{Z_1 Z_2 e^2 d}{4\pi\epsilon_0 a^2 E}$$

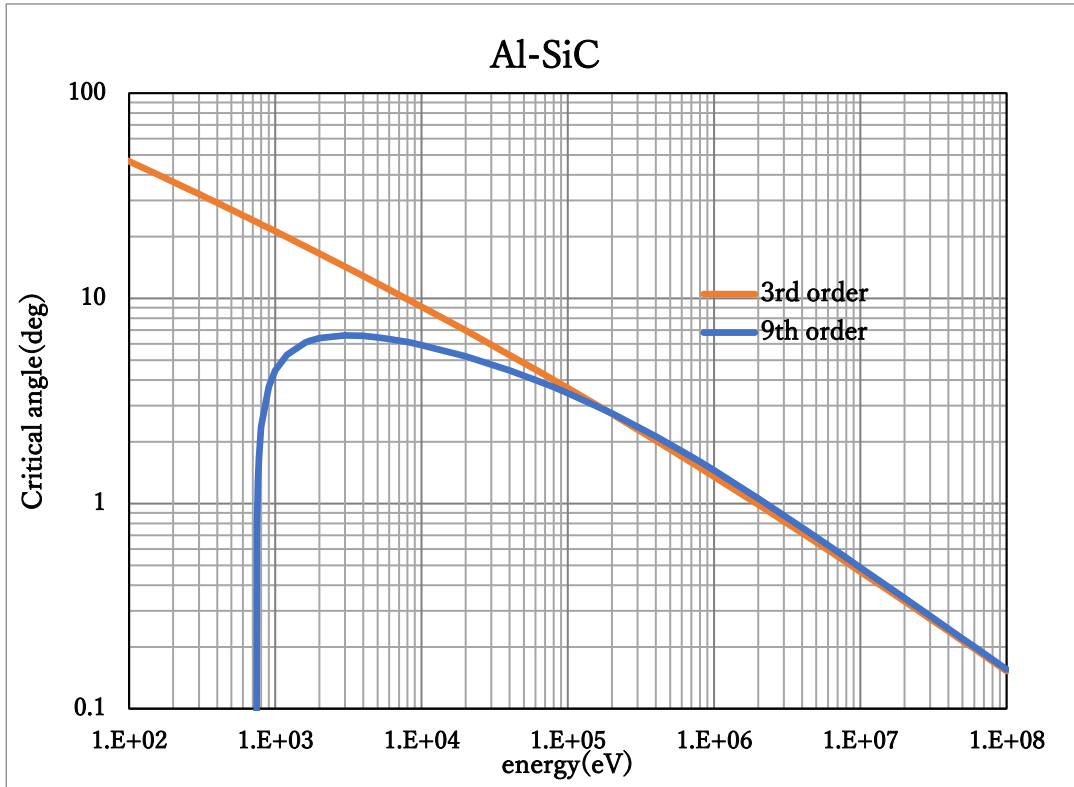
しかし3次の近似式では低エネルギー領域の取り扱いに限界があることが知られています。広いエネルギー範囲のチャネリング現象を詳細に解析するために α の平方根の9次の近似式で表現できるようになり、より精度の高い解析が行えるようになりました。

次の図には4H-SiC へ Al をチャネリング注入した場合の最近接距離の入射エネルギー依存性を示します。3 次と 9 次の近似では 100keV 以下のエネルギー領域では最近接距離が大きく乖離していることがわかります。4H-SiC の場合の $da/2$ は結晶構造から 0.89 Å となります。従って入射エネルギーが 700 eV 以下になると最近接距離が 0.89 Å よりも大きくなりチャネリングが阻害されるようになります。



臨界角度

臨界角度の定義式に基づいて4H-SiCにAlをチャネリング注入した場合の臨界角度のエネルギー依存性を求めました。最近接距離の3次と9次の近似の違いによって100 keV以下の臨界角度が解離しています。さらに700 eVがチャネリング可能となる最小エネルギーであることがわかります。この傾向は最近接距離の9次の近似式による説明からも明らかです。さらに臨界角度は入射イオンが結晶軸ポテンシャル最も近づく角度という定義でした。つまり臨界角度とはチャネリングが生じなくなる状況、つまりランダム条件に近づく場合であることを指摘しておきます。



追記事項

単一原子からなるターゲットの場合は式の扱いは簡単です。しかし化合物の場合はいくつかの考慮するべき事柄があります。

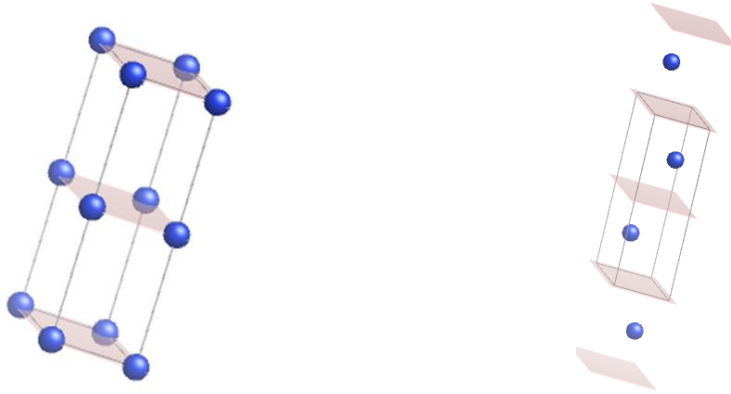
その一つがターゲットの原子番号をどのように定義するかです。通常二つの原子の場合は原子番号の平均値が用いられています。この仮定はポテンシャルの分布から妥当であることが示されています。

$$Z_{SiC} = \frac{Z_{Si} + Z_C}{2}$$

二つ目はスクリーニングパラメータの定義です。例えば SiC の場合 Al と Si のスクリーニングパラメータと Al と C のスクリーニングパラメータを求めて平均をとることができます。

$$a_{Al-SiC} = \frac{a_{Al-Si} + a_{Al-C}}{2}$$

三つめは結晶軸に沿った原子間距離の定義です。シリコンの場合は格子定数の a を適用することができます。しかし4H-SiCのような六方晶の場合は平均原子間距離を求める必要があります。下の図からわかるように結晶軸に沿った原子間距離は $c/2$ と c の場合があります。



四つ目は最小ポテンシャルの位置を求める必要があります。例えばシリコンの $\langle 100 \rangle$ 入射の場合は下の図のように原子の位置から $a/4$ の位置が最小ポテンシャルとなります。

