

チャネリングイオン注入を解析する Firsov とHoblerモデルの比較

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[1, 2]。この解説記事ではチャネリングシミュレーションの基盤となる解析モデルについて再検討を行い、チャネリング注入での電子的阻止能の評価を試みた結果を紹介します。

チャネリング現象を扱うモデルとしてはターゲットの電子雲と入射イオンの電子雲の重なりを仮定して電子の輸送現象をモデル化した Firsov モデルが 1950 年代に提唱されました[3]。El-Hoshy と Gibbons はこのモデルを拡張させて電子的エネルギー損失の入射イオンの原子番号依存性、つまり Z1 振動を再現できるモデルを提案しました[4]。一方 Oen-Robinson によっても入射イオンとターゲット原子の電子との相互作用を扱う解析モデルが提案されました[5]。Robinson が LSS モデルと Oen-Robinson モデルを採用してMARLOWEコードを開発しました[6]。Hobler は MARLOWE コードの解析モデルを改良して IMISIL というコードを開発しました[7]。さらに Tian は Hobler の解析モデルを採用した TCAD シミュレーションコードを開発しました[8]。これらのシミュレーションコードでは Z1 振動の現象は直接扱うことができませんが、衝突に関するパラメータの最適化によって SIMS プロファイルの再現に貢献しています[9]。

この記事では SIMS 測定されたチャネリングプロファイルを用いて Hobler の解析モデルを拡張させて電子的阻止能を求めた手法について解説します。El-Hoshy・Gibbons モデルによる解析結果とも比較しました。SiC へのチャネリング注入において、軽元素ではプロファイルの深い方の濃度が高くなる傾向にあります。同様に GaN へのチャネリング注入においても軽元素においてプロファイルの深い方の濃度が高くなる傾向が見られます。この傾向についても電子的阻止能の観点から考察しました。文中には数式がいくつも記載されていますが、できるだけ式の展開が理解できるように説明しています。さらにグラフも多く使って、見て理解しやすいように説明していますので最後までお読みください。

Hobler モデルによるエネルギー損失

Hobler は電子的エネルギー損失のモデルとして入射イオンの位置に依存しない Non-local エネルギー損失と入射イオンの位置に依存する Local エネルギー損失を仮定しました。それぞれの成分の比率(x^{nl} & x^{loc})を調整することによってチャネリングプロファイルを再現するモデルを提唱しています[7]。以下にモデルの解析式を示します。電子的エネルギー損失は Non-local と Local の和として以下の式で表現できます。

$$\Delta E_e = \Delta E_e^{nl} + \Delta E_e^{loc}$$

Non-local エネルギー損失は以下の式で表現されます。

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

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

$$x^{nl} + x^{loc} = 1$$

$$a = \frac{a_{12}}{\gamma}$$

ここで S_e は LSS 理論に基づく電子的阻止能を表します。 p_{max} は衝突係数の最大値、 a_{12} は遮蔽長、 γ は遮蔽長の調整パラメータを示します。

一方衝突係数 p における Local エネルギー損失は Oen-Robinson モデルに基づいて次の式で表現されています。

$$\Delta E_{loc} = x^{loc} \frac{S_e}{2\pi a^2} \exp \left\{ -\frac{p}{a} \right\}$$

El-Hoshy & Gibbons モデルによるエネルギー損失

El-Hoshy と Gibbons は入射イオンの電子とターゲット原子の電子との相互作用を扱う Firsov モデルを改良して Z_1 振動が扱えるモデルを提唱しました。このモデルによる電子的エネルギー損失は以下の式で表現されます[4]。

$$\Delta E = \frac{4.3 \times 10^{-8} (Z'_1 + Z'_2 - 1)^{5/3} \times v}{\left[1 + 0.15 (Z'_1 + Z'_2 - 1)^{1/3} \left(\frac{R_0}{a_0} \right) \frac{1}{y} \right]^5}$$

ここで v は入射イオンの速度、 R_0 はチャンネル幅の半分の値、 a_0 はボーア半径、 y はパラメータとして与えることができます。この y は入射イオンの原子半径が R_0 よりも大きい場合は 5 と設定し、入射イオン原子半径が R_0 よりも小さい場合は 10 と設定しています。

Z_1 と Z_2 はそれぞれ入射イオンの原子番号、ターゲットの原子番号を表します。プライムの付いた原子番号は最外殻の電子の埋まり具合を考慮した値が提案されています。例えば酸素の場合、最外殻である L 殻の電子の数が 6 個です。L 殻には最大 8 個の電子が許容されます。最外殻電子の数は L 殻の最大電子数の半分 (4) よりも大きいため、有効原子番号として以下の値を設定しています[4]。

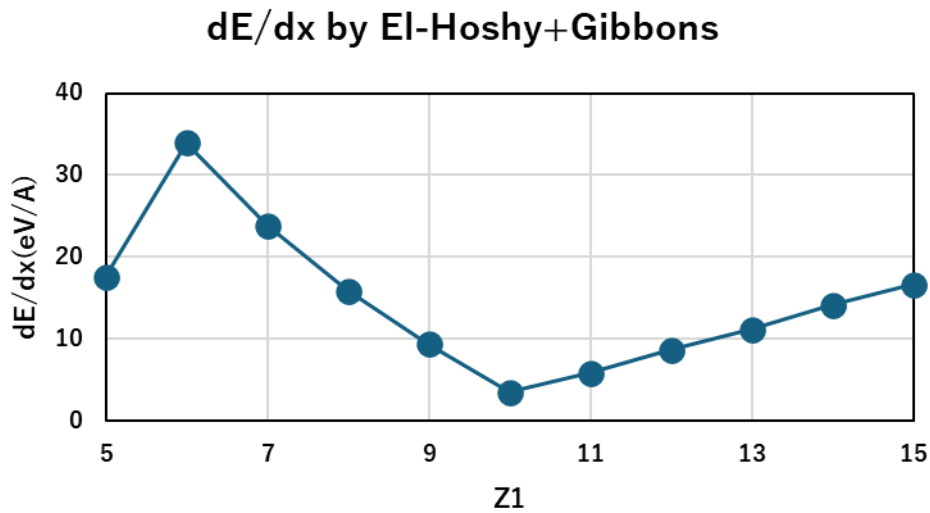
$$Z' = 6 - 2(6 - 4) = 2$$

単位長さ当たりのエネルギーロス、つまり電子的阻止能は以下の式によって求めることができます。

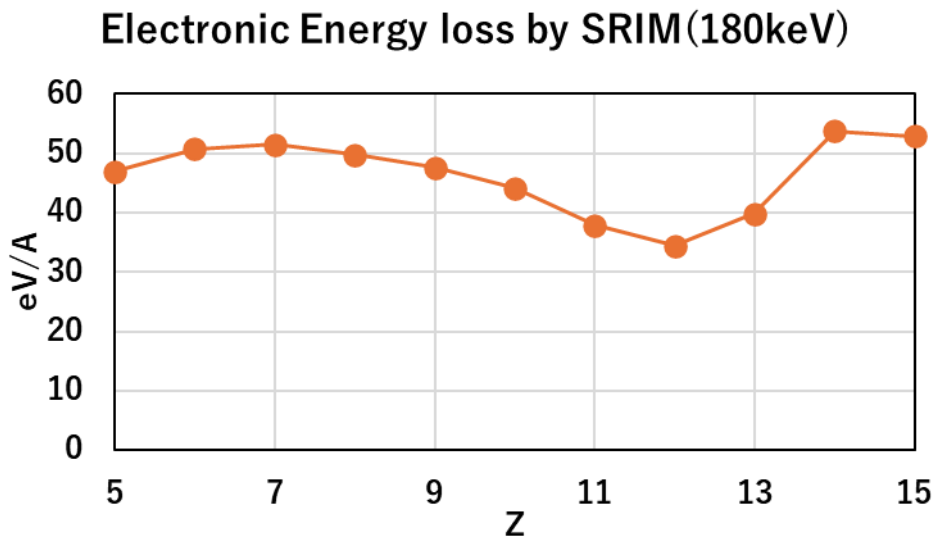
$$\frac{dE}{dx} = \frac{1}{W} \times \frac{4.3 \times 10^{-8} (Z'_1 + Z'_2 - 1)^{5/3} \times v}{\left[1 + 0.15 (Z'_1 + Z'_2 - 1)^{1/3} \left(\frac{R_0}{a_0} \right) \frac{1}{y} \right]^5}$$

ここで W は入射イオンの進行方向の原子列の距離の値を用いています。

この表現によって求められた GaN へのイオン注入の場合の電子的阻止能の入射イオン原子番号の依存性を示します。



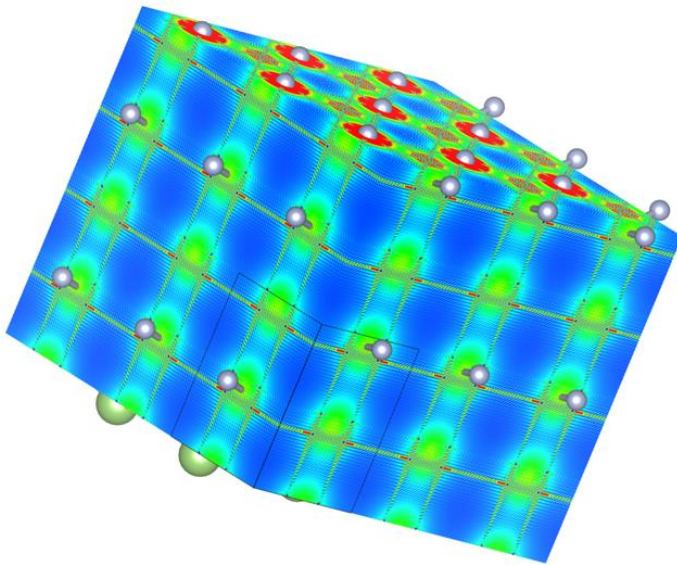
入射イオンの原子番号 Z_1 に対する電子的阻止能の変化を表現することができます。下のグラフは SRIM コードによって求められた電子阻止能の Z_1 依存性を示しています。前の阻止能の電子阻止能依存性と比較するとチャネリングイオン注入の方が Z_1 振動の振幅が大きくなっています。これは入射イオンの最外殻電子の影響が顕著に表れていると考えられます。



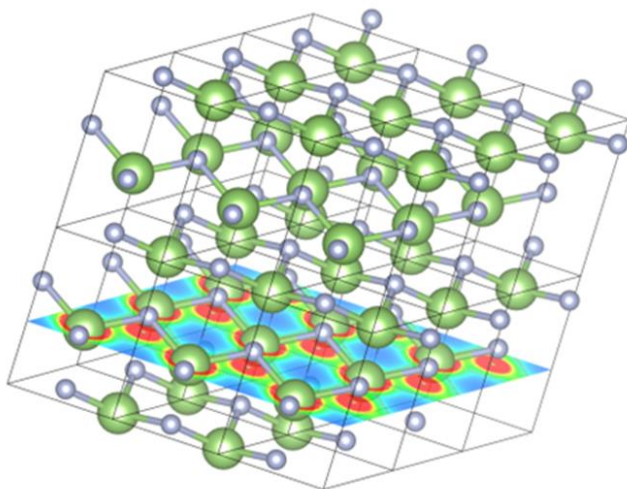
VESTA による電子密度分布の推定

結晶構造の 3 次元表示が可能なコードが公開されています[10]。このコードでは第一原理計算や X 線回折によるデータを用いて電子密度分布を 3 次元で表示することができます。一方独自にターゲット原子の構造因子を用いてフーリエ変換によって電子密度分布を解析的に求めることができます。

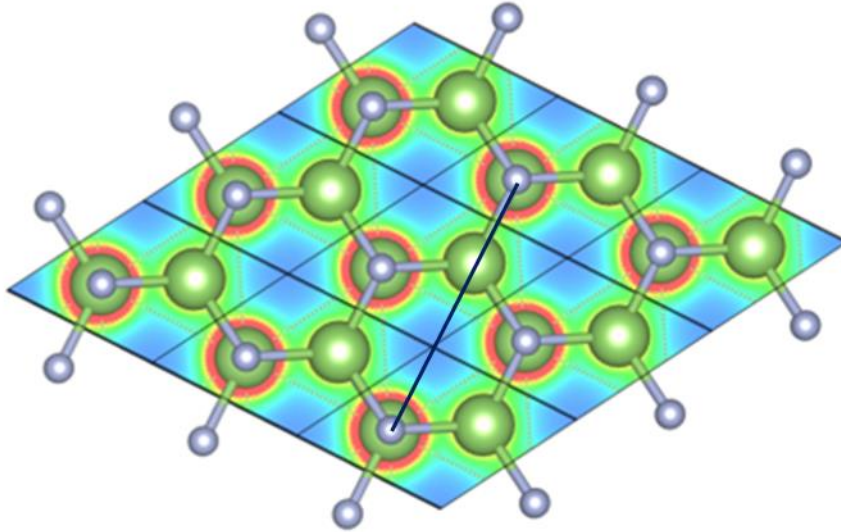
下の GaN 電子密度分布の 3 次元表示において緑色の大きな球体は Ga 原子、灰色の小さな球体は N 原子を表しています。



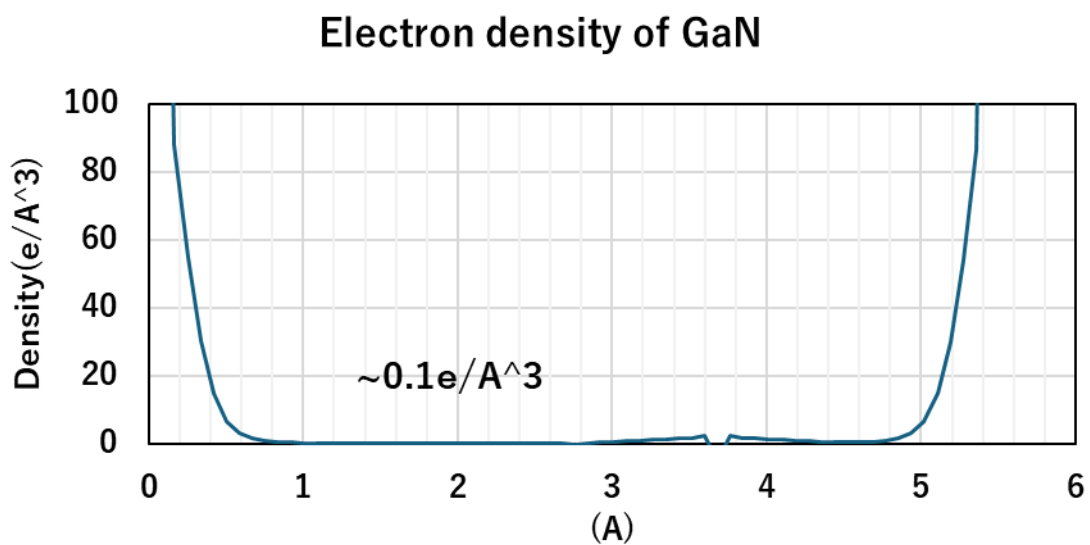
Ga 原子を横切る特定の結晶面における電子密度分布を以下に示します。電子密度分布の赤色は密度が高い領域、青色は密度が低い領域を表しています。



下の図に示す電子密度分布に引かれた濃い青色の線における電子密度の線分布を求めました。



下のグラフが電子密度分布です。横軸は Ga 原子の間の距離を表して縦軸は電子密度分布を表しています。このグラフから Ga 原子近傍の電子密度は急激に高くなることがわかります。結晶中心軸付近の電子密度は $0.1\text{e}/\text{\AA}^3$ の程度となっています。このグラフから入射イオンとターゲット原子が $1\text{\AA}$ 程度まで近づくと内殻のターゲット電子の影響が効いてくると推定されます。



電子的阻止能の推定

電子的阻止能は以下の式で表現できます。

$$\frac{dE}{dx} = \frac{dE_{nl}}{dx} + \frac{dE_{loc}}{dx}$$

それぞれの電子的阻止能の表現は以下の通りです。

$$\frac{dE_{nl}}{dx} = N S_e \times \left[x^{nl} + x^{loc} \left(1 + \frac{p_{max}}{a} \right) \exp \left\{ -\frac{p_{max}}{a} \right\} \right]$$

$$\frac{dE_{loc}}{dx} = x^{loc} \frac{S_e}{W 2\pi a^2} \times \left[\exp \left\{ -\frac{p_{max}}{a} \right\} \right]$$

一般に飛程はエネルギー E_0 を持つ粒子がエネルギーを失って実質的に動かなくなるまでに進む平均距離です。飛程の定義はいくつかありますが、ここではCSDA 飛程という定義を採用しました。このCSDAというはContinuous Slowing Down Approximationの略で、粒子が直進しながら連続的にエネルギーを徐々に失うと仮定して求めた飛程となります。チャネリング注入の場合は、粒子はほぼチャネリング軸を直進するためこの定義を採用するのは妥当と考えます。

トータルの電子的阻止能は以下の式で表されます。

$$\frac{dE}{dx} = S_e \times \left[N \left\{ x^{nl} + (1 - x^{nl}) \left(1 + \frac{p_{max}}{a} \right) \exp \left(-\frac{p_{max}}{a} \right) \right\} + \frac{(1 - x^{nl})}{W} \frac{1}{2\pi a^2} \exp \left(-\frac{p_{max}}{a} \right) \right]$$

この式で S_e はエネルギーの平方根であるため、式を変形して距離の積分に対応してエネルギーの積分の形で表現できます。入射イオンのエネルギーが零となる位置が入射イオンの最大到達距離となります。

$$\begin{aligned} R_{max} &= \int_0^{R_{max}} dx \\ &= \int_{E_0}^0 \frac{dE}{k \sqrt{E} \left[N \left\{ x^{nl} + (1 - x^{nl}) \left(1 + \frac{p_{max}}{a} \right) \exp \left(-\frac{p_{max}}{a} \right) \right\} + \frac{(1 - x^{nl})}{W} \frac{1}{2\pi a^2} \exp \left(-\frac{p_{max}}{a} \right) \right]} \end{aligned}$$

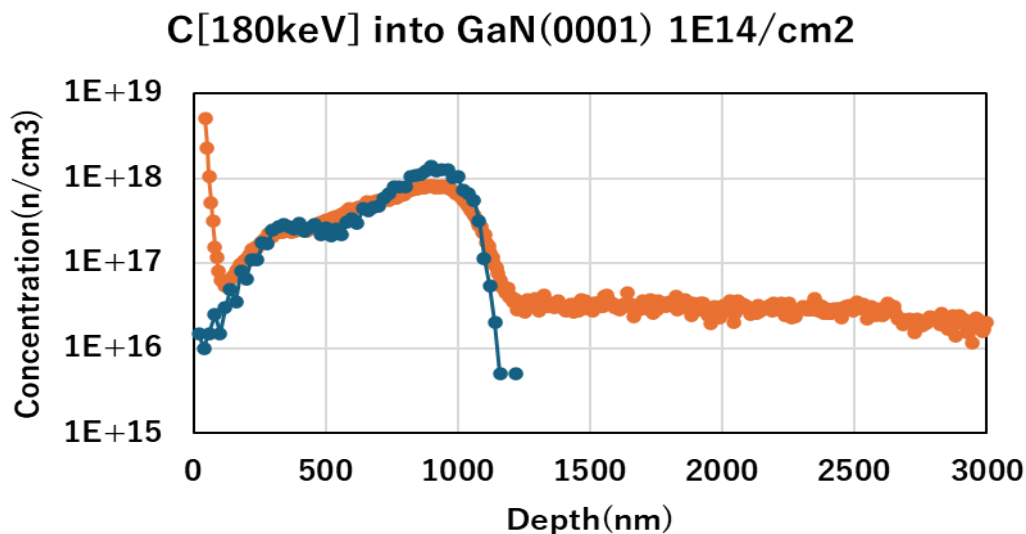
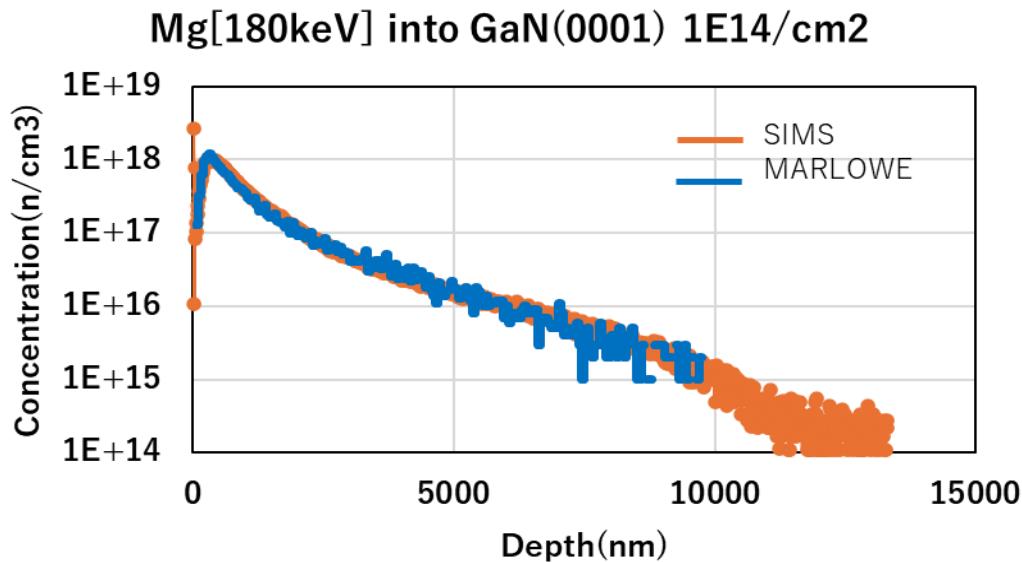
この積分を実行すると次のような簡単な結果になります。

$$R_{max} = \frac{2\sqrt{E_0}}{K}$$

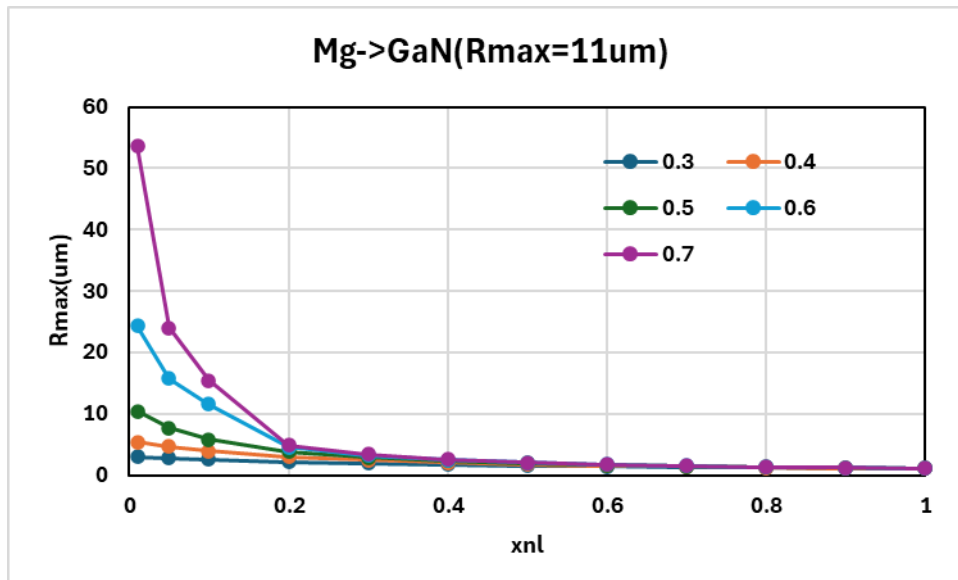
$$K = k \left[N \left\{ x^{nl} + (1 - x^{nl}) \left(1 + \frac{p_{max}}{a} \right) \exp \left(-\frac{p_{max}}{a} \right) \right\} + \frac{(1 - x^{nl})}{W} \frac{1}{2\pi a^2} \exp \left(-\frac{p_{max}}{a} \right) \right]$$

この数式の中に現れる p_{max} は入射イオンとターゲット原子の電子雲との相互作用が影響を及ぼす距離とみなせます。この記事では GaN の平均原子半径の値を参考にして値を決定しました。

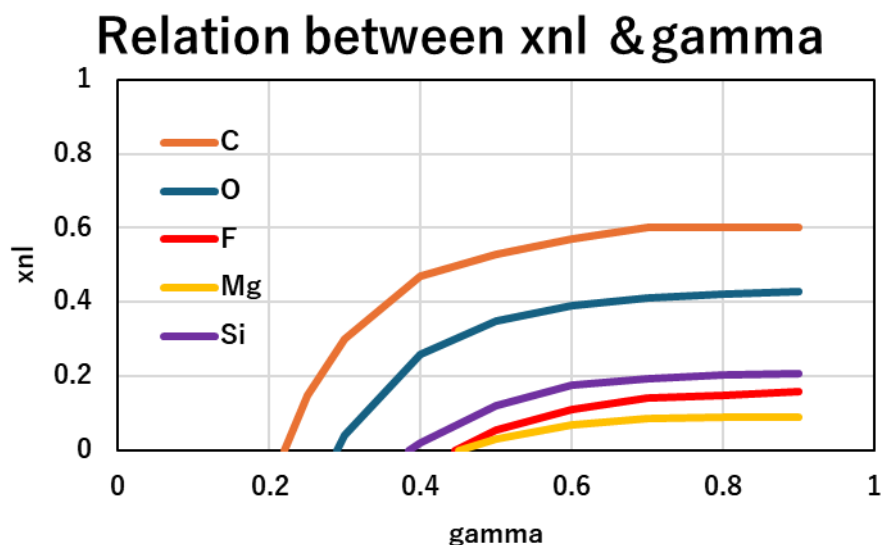
SIMS によって得られたプロファイルがバックグラウンドに達する位置を R_{max} と定義しました。チャネリングプロファイルの最大濃度が 10%まで低下する深さを採用している報告もあります。しかし入射イオンの種類によるプロファイルの違いが $R_{10\%}$ では表現できないことがあるため、プロファイルがバックグラウンドに達する位置を採用して解析を行いました。180keV の Mg と C を GaN(0001)面にチャネリング注入した場合の SIMS プロファイルと MARLOWE によるフィッティング結果を示します[11]。



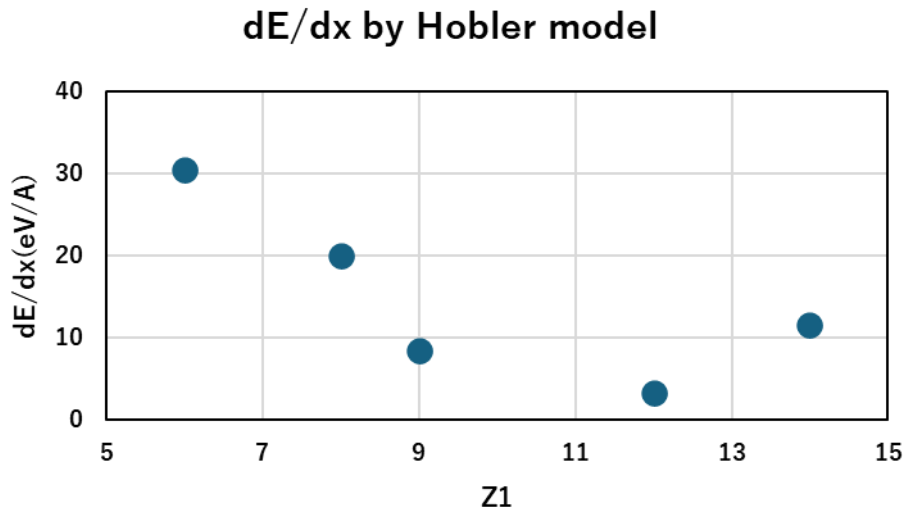
Rmax を決定し、これを満たす γ と x^{nl} の組み合わせを求めました。Non-local エネルギー損失の比率 x^{nl} はチャネリングプロファイルを浅くする方向に寄与し、 γ はチャネリングプロファイルのすそ野を広げる方向に寄与します。その傾向が下のグラフから読み取れます。先に記載した数式からわかるように Rmax を満たす限り γ と x^{nl} の組み合わせに寄らず電子的阻止能の値は同じです。



しかし x^{nl} がゼロの場合は Rmax を満たす γ の値は最小値を示し、 γ が大きくなると共に x^{nl} が大きくなるのが次のグラフからわかります。他のイオン種についても同様の解析を行った結果を次のグラフに示します。なお MARLOWE による SIMS プロファイル再現のために求められた γ と x^{nl} の組み合わせはこれらの曲線上に乗ることが確かめられました。



Rmax を定めて電子的阻止能の値を求めました。その結果を次の図に示します。



下の表に示されている通り、前述の El-Hoshy-Gibbons モデルから求められた電子的阻止能の値とおおよそ一致していることがわかります。

	Se by Hobler(eV/A)	Se by Hoshy-Gibbons(eV/A)
C	32	34
O	20	16
F	9	9.4
Mg	3	8.7
Si	12	14

Mg のチャネリングプロファイルは 10 ミクロン程度まで広がりますが、軽元素の C では同じエネルギーでも 1 ミクロン程度までしか広がりません。これは C の電子阻止能が Mg に比べて十倍ほど大きく、C はエネルギーを失いやすくなります。この結果チャネリングプロファイルは Mg と比べて浅くなります。さらにチャネリングプロファイルの入射イオンによる変化の傾向を明確にするために SRIM から求められる電子阻止能と今回求められたチャネリング注入における電子阻止能の比を考慮しました。簡素化された Rmax の式からランダムとチャネリングの最大飛程の比率は次の式のように電子阻止能の比の逆数になります。

$$\frac{R_{max}^{ch}}{R_{max}^{ran}} = \frac{K_{ran}}{K_{ch}}$$

つまりランダムに比べてチャネリングの電子的阻止能が非常に小さい場合はチャネリングプロファイルのランダムピークに比べてチャネリングテイルが深くまで広がります。一方電子的阻止能の比率が同等の場合はランダムピークに比べてチャネリングテイルの広がりが小さいことになります。

	Se by Hobler(eV/A)	Se by SRIM (eV/A)	Se (SRIM)/Se (Hobler)
C	32	50	1.6
O	20	50	2.5
F	9	48	5.2
Mg	3	35	12
Si	12	52	4.3

この計算結果から C ではチャネリングの電子的阻止能がランダムの電子的阻止能と近い値であるため、チャネリングプロファイルのテイルはランダムピークのやや深い位置になります。一方 Mg はチャネリングの電子的阻止能がランダムの電子的阻止能よりも非常に小さいためチャネリングイオンは深い領域まで侵入する傾向が分かります。

まとめ

MARLOWE コードによるシミュレーションの前提となる解析モデルを見直しました。チャネリングプロファイルが入射イオンによって異なる要因が入射イオンの原子番号によって電子的阻止能が振動することであると推定されました。Firsov モデルを改良した El-Hoshy・Gibbons モデルを実際に計算した結果 Hobler モデルから $R_{\max}$ を用いた計算によって求められた電子的阻止能の値は対応が取れることが確認できました。軽元素イオン注入においてチャネリングプロファイル濃度分布が逆転する傾向について、チャネリングとランダム注入の電子的阻止能を比較することによって推定できました。

この記事を通してチャネリングシミュレーションの背景にある電子エネルギー損失の解析式から入射イオンによる SIMS プロファイルの原子番号依存性を表現できたことを紹介しました。MARLOWE コードは結晶へのイオン注入において、SIMS によるプロファイルを再現できますが、根底となる解析モデルを理解しておく必要があります。Non-local エネルギーロスのパラメータはターゲット原子の電子雲が入射イオンに影響を与えるか与えないかの切り分けであると言えます。その切り分けは衝突係数 p によって決まります。衝突係数 $p_{\max}$ よりも小さい位置における入射イオンは Local エネルギーロスを経験し、 $p_{\max}$ よりも大きい位置に入射するイオンは Non-local エネルギーロスを経験すると仮定しています。結局 MARLOWE コードによって SIMS プロファイルを再現できる x^{nl} などのパラメータは、電子的阻止能の値を決めていることとなります。つまりチャネリングイオン注入の電子的阻止能はランダムイオン注入に比べて低い値を示すことが確認できました。

参考文献

- [1] A. Suyama, H. Minagawa, M. Aoki, and K. Yokota, Jpn. J. Appl. Phys. 64 086502 (2025)
- [2] S. Kozakai, M. Kameko, and T. Kimoto, Jpn. J. Appl. Phys. 65 020908 (2026)
- [3] O.B. Firsov, Sov. Phys. JETP 36 No.5 1076 (1959)
- [4] A.H. El-Hoshy and J.F. Gibbons, Phys. Rev. 173 454 (1968)
- [5] O.S. Oen and M.T. Robinson, Nucl. Instr. Methos. 132 647 (1976)
- [6] M.T. Robinson and I.M. Torrens, Phys. Rev. B9 Num.12 5008 (1974)
- [7] G. Hobler, Rad. Effects Solid. 139 1 21 (1996)
- [8] S. Tian, J. Appl. Phys. 93 N0.10 5893 (2003)
- [9] M.K. Linnersson, L. Vines and A. Hallen, J. Appl. Phys. 130 075701 (2021)
- [10] K. Momma and F. Izumi, "VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data," J. Appl. Crystallogr., 44, 1272-1276 (2011).
- [11] M. Aoki, H. Minagawa, K. Yokota and A. Suyama, Proc. the 44th Sym. on Material Science & Engineering Research Center of Ion Beam Technology Hosei University, 45 (2025)