

非晶質基板への高エネルギー入射イオンに対する電子阻止能

長谷川 誠 一*

Electronic Stopping Power for Energetic

Implanted Ions in Amorphous Substrates

by

Seiichi HASEGAWA

Abstract Results of measurement so far published on the electronic stopping power in various amorphous and crystalline substrates show periodic dependence of the stopping power on the atomic number of the incident ions. On the contrary, the theoretical values for the electronic stopping power in amorphous substrates made public up to now increase monotonously with the atomic number. In the present paper, the author proposes to apply the atomic wave function instead of commonly used Thomas-Fermi treatment for determining theoretically the electronic stopping power in amorphous substrate, especially with respect to the origin of its periodicity with atomic numbers. Results of calculations confirming the validity of the proposal are added.

1 ま え が き

半導体への不純物添加の方法としてのイオン打込み法の利点の一つは、不純物の分布の深さや分布の形を制御しやすいことである。これらの不純物の分布の深さや分布の形を求める理論,¹⁾そして又、打込みの際作られる格子欠陥の分布の深さや分布の形を求める理論はすでにいくつか出されており、²⁾それらは実験結果とある程度の一致を見ている。しかし打込みの原子の種類によっては、かなり大きな差異が出ている。この原因としては、これらの理論値に於て使われている電子阻止能、核阻止能とよばれるパラメータの正確な値が得られていないことが、その大きな原因の一つになっている。実際、電子阻止能に対しては、同一の基板に対して打込みの原子の種類を変えると、上述の理論値では原子量と共に単調に増大するのに対して、実験結果は原子量によって振動している。³⁻⁵⁾基板が結晶の場合には、この振動を説明する理論がいくつか出ているが、⁶⁻⁸⁾基板が非晶質の場合には、その振動を説明する理論は今の所ない。

本報告では、基板が非晶質の場合の電子阻止能の一般形を求め、それに Slater の原子軌道関数⁹⁾を使って電子阻止能を求めた結果を報告する。

*電子工学科**

2 理論的背景

固体中に、ある大きさのエネルギーをもつ荷電粒子が入射された時、その粒子は固体中を運動していく間に、固体を構成する原子核との衝突や電子的な相互作用により、そのエネルギーを失い、ついには静止する。荷電粒子の原子量が小さいか、又はその粒子のもつエネルギーが大きくなると、後者の相互作用は前者と同程度、又はそれより大きくなって来る。この両者の作用は互いに独立であると仮定すれば（この仮定は、実験事実との対応により、妥当性が認められている。）、入射粒子の径路の単位長当りに失われる平均エネルギーは次式で与えられる。

$$-\frac{dE}{dx} = N[S_n(E) + S_e(E)]. \quad (1)$$

ここで(1)式の右辺の第1項は核との衝突によって失われるエネルギーで、 $S_n(E)$ は核阻止能(nuclear stopping power)とよばれる。第2項は電子的な相互作用によって失われるエネルギーであり、 $S_e(E)$ は電子阻止能(electronic stopping power)とよばれる。 N は基板を構成する原子の単位体積当りの平均濃度である。

荷電粒子が非晶質基板に打込まれる場合には、(1)式より $S_n(E)$, $S_e(E)$ は次式で示される^{1,10)}

$$S_n(E) = \int_0^\infty T_n d\sigma = \int_0^\infty T_n 2\pi P dP, \quad (2)$$

$$S_e(E) = \int_0^\infty T_e d\sigma = \int_0^\infty T_e 2\pi P dP. \quad (3)$$

ここで、 T_n , T_e は1回の衝突で基板側の原子に伝達されるエネルギーであり、 $d\sigma$ は微分断面積、 P はインパクト・パラメータである。以下(3)式の電子阻止能 $S_e(E)$ について述べる。

$S_e(E)$ に対する理論としては、Lindhard 等¹⁾と O.B.Firsov¹¹⁾ が別個に理論式を与えており、両者の値はほぼ一致している。Lindhard 等は基板が非晶質の場合に対して、一定の濃度をもつ電子雲の中を荷電粒子が運動するというモデルを考えて、Thomas-Fermi モデルを使って次の $S_e(E)$ を求めた。

$$S_e(E) = 25.13 \times \xi_e \frac{Z_1 Z_2}{Z} u. \quad (\text{atomic unit}). \quad (4)$$

ここで、 Z_1 , Z_2 は原子量であり、 $\xi_e \sim Z_1^{-1/4}$, $Z = (Z_1^{3/4} + Z_2^{3/4})^{4/3}$ として u は荷電粒子の相対速度である。一方 Firsov は、電子のもつ平均速度はそれが所属する原子の平均速度に等しいと仮定して、その電子が1つの Field 中から他の原子の Field 中へ移動する時、その電子のもつ運動量も又伝達されると仮定した。これらの仮定のもとで、彼は1回の衝突当りに伝達されるエネルギーとして次式を得た。

$$dE = \int \left[\int_s \frac{nv}{4} ds \right] \dot{R} dR. \quad (\text{atomic unit}) \quad (5)$$

S は2つの原子を結ぶ線分を直角に2等分する無限平面であり、 n , v はそれぞれ、その平面 S 上での平均電子濃度、平均電子速度である。 \dot{R} は原子の相対速度である。(5)式の n , v に対して、彼は Thomas-Fermi モデルの取り扱いをすることにより、 n , v を次式に示す potential ψ で関係づけ $S_e(E)$ を求めた。

$$\psi = \frac{Z_1 + Z_2}{r} \phi(\alpha r). \quad (\text{atomic unit}) \quad (6)$$

ここで、 ϕ は Thomas-Fermi 遮蔽関数であり、 $\alpha = 1.13 \times (Z_1 + Z_2)^{1/2}$ (Thomas-Fermi constant) である。

$$S_e(E) = 6.727 \times (Z_1 + Z_2) u. \quad (\text{atomic unit}) \quad (7)$$

(7)式で, $u=|\dot{\mathbf{R}}|=(2E)^{1/2}$ である。

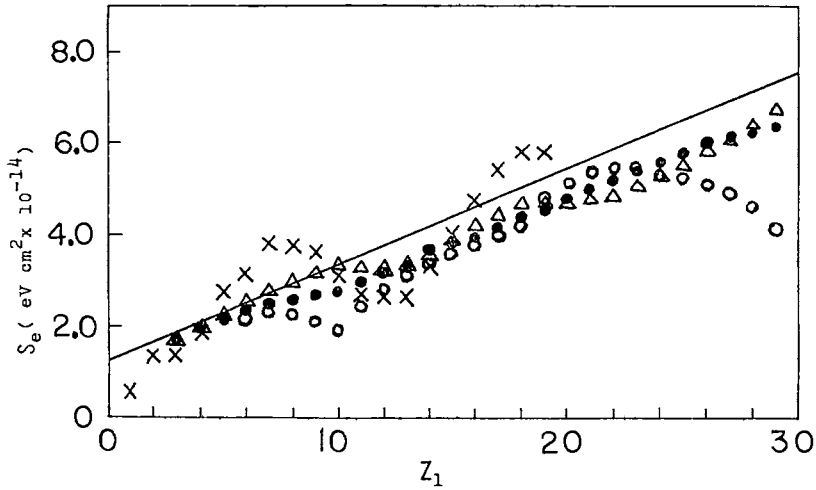


Fig. 1 Electronic stopping power as a function of the atomic number of the incident ion ($u=9 \times 10^7 \text{ cm/s}$) in amorphous carbon. (see ref. 3)) Crosses, solid line, triangles, closed circles and open circles are experimental values, eq. 7, eq. 26, $Se(E)$ calculated by eq. 27 and $Se(E)$ calculated by eq. 28, respectively.

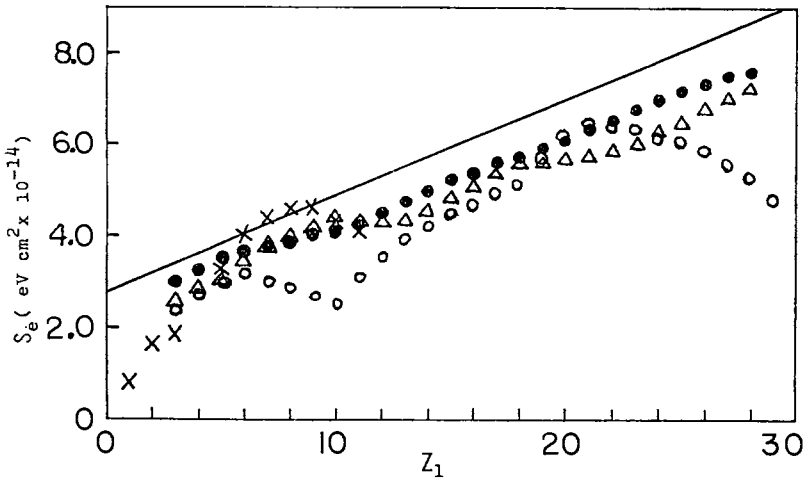


Fig. 2 Electronic stopping power as a function of the atomic number of the incident ion ($u=9 \times 10^7 \text{ cm/s}$) in amorphous aluminum. (see ref. 3)) Crosses, solid line, triangles, closed circles and open circles are experimental values, eq. 7, eq. 26, $Se(E)$ calculated by eq. 27 and $Se(E)$ calculated by eq. 28, respectively.

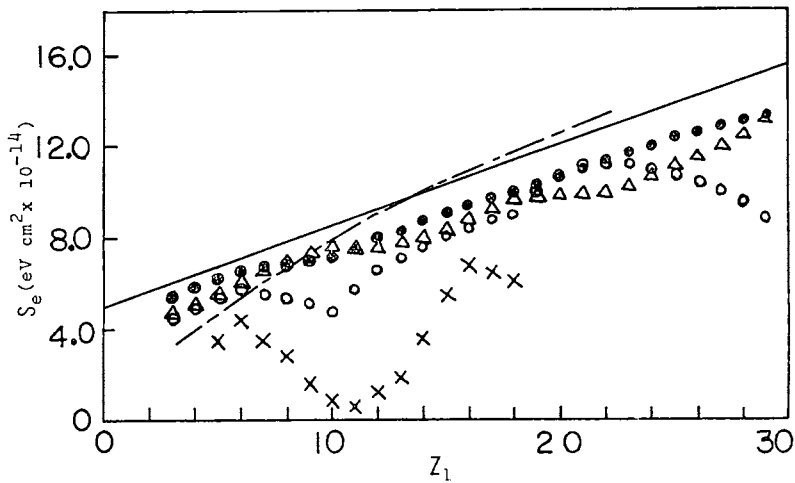


Fig. 3 Electronic stopping power as a function of the atomic number of the incident ion ($u=1.5 \times 10^8 \text{ cm/s}$) for the amorphous silicon and the $\langle 110 \rangle$ direction in silicon single crystals. (see ref.4)) Crosses, solid line, dot-and-dash line, triangles, closed circles and open circles are experimental values for the $\langle 110 \rangle$ direction, eq. 4, eq. 7, eq. 26, $S_e(E)$ calculated by eq. 27 and $S_e(E)$ calculated by eq. 28, respectively.

(4)式, (7)式で示される $S_e(E)$ の値は, Figs. 1—3に見られるように, Z_2 を打込み基板の原子量とすれば, 打込みイオンの原子量 Z_1 の増大と共に単調に増大しているのに対して, 実験結果は Z_1 を増すと $S_e(E)$ 値は振動している。この原因として, 両式共に使われたモデルが, 平均的な値を示す Thomas-Fermi モデルであるためと考えられる。

3 非晶質基板に対する電子阻止能

始めに, 打込まれた基板が非晶質である場合について, (5)式より, $n(r)$, $v(r)$ の関数として, $S_e(E)$ の一般形を求めて見よう。

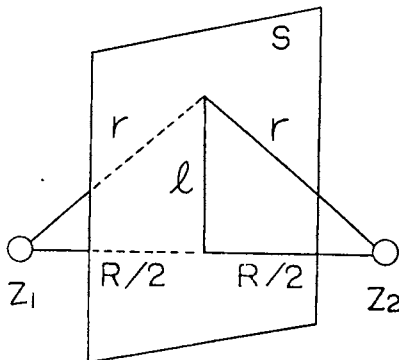


Fig. 4 Illustration for relative position of two particles. (incident ion and target atom)

(5)式における R は Fig. 4 に示されている原子間の距離であり, n , v は r の関数であるから, $\mathbf{R}d\mathbf{R}=u dx$ とすれば(5)式は

$$\Delta E = \frac{u}{4} \int \left[\int n(r) v(r) ds \right] dx. \quad (8)$$

ここで Fig. 4 より,

$$ds = 2\pi l dl, \quad (9)$$

$$r^2 = (R/2)^2 + l^2. \quad (10)$$

又 $|R|$ の最小値を R_0 (\approx インパクト・パラメータ) とすれば

$$R^2 = R_0^2 + x^2. \quad (11)$$

(9), (10), (11)式より(8)式は

$$\Delta E = \frac{\pi u}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_0^{\infty} n(r) v(r) l dl \right] dx. \quad (12)$$

ここで,

$$r^2 = P^2 + P_0^2, \quad (13)$$

$$P^2 = (x/2)^2 + l^2, \quad (14)$$

$$P_0^2 = (R_0/2)^2, \quad (15)$$

の変数変換を行うと

$$\begin{aligned} \Delta E &= \frac{\pi u}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{\frac{x}{2}}^{\infty} n(P) v(P) P dP \right] dx \\ &= 2 \pi u \int_0^{\infty} n(P) v(P) P^2 dP. \end{aligned} \quad (16)$$

ここで再び, 変数 P を変数 r に変換すると

$$\Delta E = 2 \pi u \int_{P_0}^{\infty} n(r) v(r) \sqrt{r^2 - P_0^2} r dr. \quad (17)$$

次に(13)式より, $T_e \sim \Delta E$ であるから

$$\begin{aligned} S_e(E) &= \int_0^{\infty} \Delta E d\sigma \\ &= 8 \pi \int_0^{\infty} \Delta E P_0 dP_0. \end{aligned} \quad (18)$$

(17)式を(18)式に代入することにより

$$\begin{aligned} S_e(E) &= 16 \pi^2 u \int_0^{\infty} \left[\int_{P_0}^{\infty} n(r) v(r) \sqrt{r^2 - P_0^2} r dr \right] P_0 dP_0 \\ &= 16 \pi^2 u \int_0^{\infty} n(r) v(r) r \left[\int_0^r \sqrt{r^2 - P_0^2} P_0 dP_0 \right] dr \\ &= \frac{16}{3} \pi^2 u \int_0^{\infty} n(r) v(r) r^4 dr. \end{aligned} \quad (19)$$

(19)式に正確な $n(r)$, $v(r)$ を代入すれば良いのであるが, それは困難であるので, まず $n(r)$ の近似値として, Slater の示した原子波動関数を用いて見よう.**

Slater 軌道の角度部分については, 全角度で平均すれば (軌道は球対称であると仮定する), Slater 軌道は

$$\varphi(r) = C_{nl} r^{(n^* - 1)} \text{EXP} \left(-\frac{Z_n^*}{n^*} r \right). \quad (20)$$

ここで, C_{nl} は規格化常数, n^* は有効主量子数, Z_n^* は有効核電荷であり,

$$(C_{nl})^2 = \left(\frac{2Z_n^*}{n^*} \right)^{2n^* + 1} / 4\pi \Gamma(2n^* + 1), \quad (21)$$

$$Z_n^* = Z - S_{nl}. \quad (22)$$

(22)式の S_{nl} は遮蔽常数である。

$n(r)$ は $|\varphi|^2$ で与えられるから, これを(18)式に代入すると

** 打込み基板は非晶質であるので, 原子軌道で十分良い近似になっていると考えられる。又より正確に求めるには, Slater 軌道の代りに, Hartree-Fock 近似で求めた原子軌道を用いれば良いが, 複雑であるので, ここでは Slater 軌道を用いる。

$$S_e(E) = \frac{16\pi^2}{3} u \sum_{n_1, n_2} \left[\int_0^\infty \left\{ N_{n_1 l}^1 (C_{n_1 l}^1)^2 r^{2(n_1^* - 1)} \text{EXP} \left(-\frac{2Z_{n_1}^*}{n_1^*} \right) + \right. \right. \\ \left. \left. N_{n_2 l}^2 (C_{n_2 l}^2)^2 r^{2(n_2^* - 1)} \text{EXP} \left(-\frac{2Z_{n_2}^*}{n_2^*} \right) \right\} \times v(r) r^4 dr \right] \quad (23)$$

(23)式で、 $N_{n_1 l}^1$ 、 $N_{n_2 l}^2$ は各原子に於ける各軌道に入っている電子数である。

$v(r)$ が決まれば $S_e(E)$ が求まるが、正確な $v(r)$ を求めることは非常に困難である。そこで $v(r)$ として、近似的に Thomas-Fermi の取扱いをしてみよう。Thomas-Fermi モデルでは $v(r)$ は

$$\{v(r)\}^2 \approx \frac{Z}{r} \phi(ar). \quad (24)$$

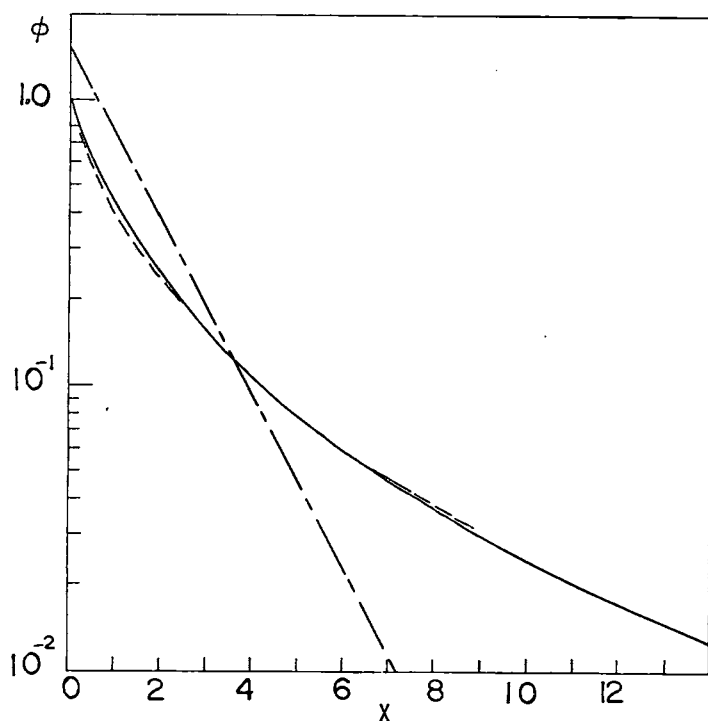


Fig. 5 Screening function. Solid line, dot-and-dash line, dashed line are Thomas-Fermi screening function, eq. 25 and eq. 27, respectively.

$x \equiv ar$ とおいた時の $\phi(x)$ の値は Fig. 5 に示されている。 $\phi(x)$ の値は数値計算でしか得られないため、 $\phi(x)$ として数学的に取扱いやすいエクスポネンシャルタイプの遮蔽関数を仮定してみよう。

$$\phi(ar) = 1.5 \text{EXP}(-0.7ar). \quad (25)$$

とすれば

$$S_e(E) = 2\pi(Z_1 + Z_2)^{1/2} u \sum_{n_1, n_2} N_{n_1}^1 \left\{ \left(\frac{2Z_{n_1}^*}{n_1^*} \right)^{2n_1^*+1} / \left(\frac{2Z_{n_1}^*}{n_1^*} + 0.35a \right)^{2n_1^*+5/2} \right\} \frac{\Gamma(2n_1^*+5/2)}{\Gamma(2n_1^*+1)} \\ + N_{n_2}^2 \left\{ \left(\frac{2Z_{n_2}^*}{n_2^*} \right)^{2n_2^*+1} / \left(\frac{2Z_{n_2}^*}{n_2^*} + 0.35a \right)^{2n_2^*+5/2} \right\} \frac{\Gamma(2n_2^*+5/2)}{\Gamma(2n_2^*+1)}. \quad (26)$$

となる。(26)式を計算した結果はFigs. 1—3に示されている。(26)式から求まる $S_e(E)$ の値は、 Z_1 を増すと、実験結果と同じ付近にわずかな振動が見られるが、Thomas-Fermi モデルを使って求めた(4)式や(7)式の $S_e(E)$ の値と比べて、大きな差異は見られない。さらに、 $\phi(ar)$ として Fig. 5 に示されているように、Thomas-Fermi 遮蔽関数に非常に似ている次式を用いると、このわずかな振動も見られなくなる。

$$\phi(ar) = 1/[1 + 0.265(ar)^{3/4}]^4 \quad (27)$$

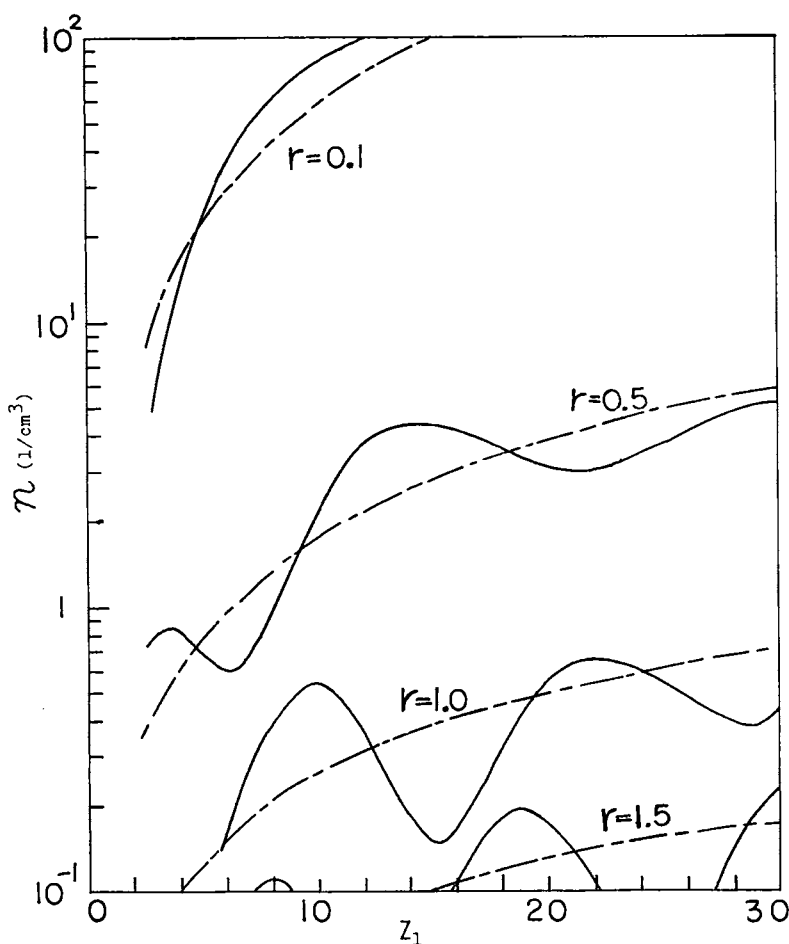


Fig. 6 Electron densities calculated by Thomas-Fermi model (dot-and-dash line) and Slater orbitals (solid line).

Slater 軌道から求められる $n(r)$ の値は Fig. 6 に示されているように、原子量を増すと、その値は振動するのに対して、Thomas-Fermi モデルから得られる $n(r)$ の値は単調で、Slater 軌道からの $n(r)$ の値の平均値を示している。このように Slater 軌道から求められる $n(r)$ の値は、原子量の変化に対して単調でないにもかかわらず、②6式の $S_c(E)$ や②7式を使って求められる $S_c(E)$ の値は、 Z_1 に対してほとんど単調な変化となる。この原因として、 $v(r)$ として Thomas-Fermi モデルを用いたことが大きな要因と考えられる。 $n(r)$ として、Thomas-Fermi モデルを用いても、Slater 軌道を用いても大差なく、正確な $v(r)$ の値を使うことが重要なことであると考えられる。このことは、 $S_c(E)$ の Z_1 依存性は $n(r)$ の Z_1 依存性によっているとした、D.E.Hwison Jr. の考え⁸⁾と相反している。

Figs. 1—3 を見れば判るように、 $S_c(E)$ の値は元素周期表に従って変化していると思われることから、 $v(r)$ としては、外殻が閉殻又は外殻電子の数が少いほど大きく、外殻に電子が $\frac{1}{2}$ だけつまっている原子に対して最少となるような関数になっているであろう。このような $v(r)$ として、Hartree-Fock 近似で計算された Potential¹²⁾ (この値は原子量の変化に対して、Fig. 1—3 における実験結果とほぼ同じ周期性を示している。) を②4式で使うことが考えられるが、その数式的取扱いは複雑である。そこで、上記の Potential と定性的によく似ている A.H.El-Hoshy 等によって与えられた次式の Potential⁶⁾ を②4式に使って見よう。

$$\{v(r)\}^2 \approx \frac{Z_1' + Z_2'}{r} \phi(a'r) \quad (28)$$

ここで、 $a' = 1.13 \times (Z_1' + Z_2')^{1/2}$ であり、 Z_1' 、 Z_2' は最外殻電子数 (軌道は主量子数にのみ依存していると仮定する。) から求められる原子量である。 ϕ として②7式を使い、②8式を②3式に代入して $S(E)$ を求めた結果は Figs. 1—3 に示されている。その結果は $v(r)$ として Thomas-Fermi モデルを使って求めた結果と比較して、実験値とほぼ同じ振動を示している。このように $v(r)$ の値を決めることは $S_c(E)$ を求める上で非常に重要なことである。②8式はかなりあいまいな近似であるため、より正確な $v(r)$ の値を決めることが、今後の課題である。

参 考 文 献

- 1) J. Lindhard, M. Scharff and H. E. Schiøtt : Mat. Phys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **33**No. 14 (1963) 1.
- 2) D. K. Brice : Rad. Effects **6** (1970) 77.
- 3) J. H. Ormrod, J. R. Macdonald and H. E. Duckworth : Can. J. Phys. **43** (1965) 275.
- 4) F. H. Eisen : Can. J. Phys. **46** (1968) 561.
- 5) L. Eriksson, J. A. Davies and P. Jespersgaard : Phys. Rev. **161** (1967) 219.
- 6) A. H. El-Hoshy and J. F. Gibbons : Phys. Rev. **173** (1968) 454.
- 7) L. M. Cheshire, G. Dearnaley and J. M. Poate : Phys. Letters **27A** (1968) 304.
- 8) D. E. Harrison Jr. : Appl. Phys. Letters **13** (1968) 277.
- 9) J. C. Slater : Phys. Rev. **38** (1930) 57.
- 10) J. F. Gibbons : Proc. IEEE **56** (1968) 295.
- 11) D. B. Firsov : Soviet Phys. **38** (1959) 1076.
- 12) F. Herman and S. Skillman : *Atomic Structure Calculations* (Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J., 1963)

(昭和48年5月19日受理)