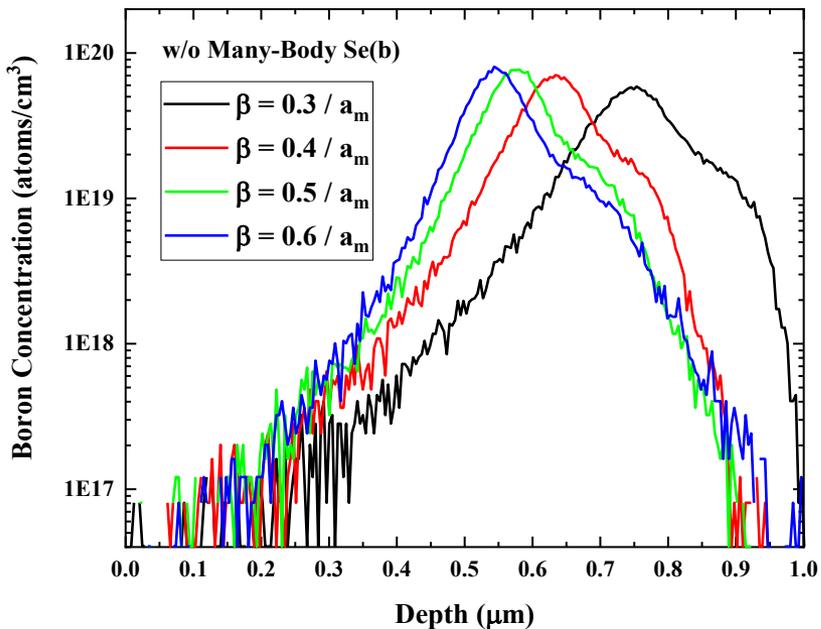


電子阻止能(Se(b)) として 「Oen with many-body」 を選択した場合とそうでない場合

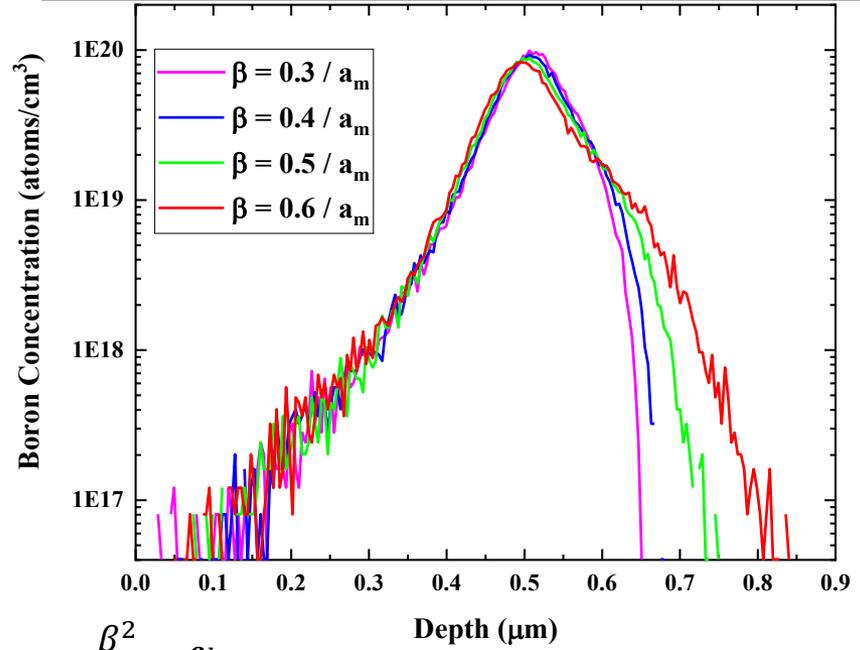
scatGUIでは、Se(b) (衝突係数依存の電子阻止能) はZieglerの電子阻止能に規格化されている。
 v1.39までは、最近接原子からのSe(b)のみ考慮されていた。
 ダイヤモンドのように原子間隔が狭い場合、第2近接以上の原子からの電子阻止能も足し合わせないと正しい飛程が計算出来ないため「Oen with many-body」を開発した。

ランダム注入

最近接原子のみを考慮した計算



第2近接以上の原子からの電子阻止能も考慮した計算 (Se(b) : Oen with Many-Body)



$$S_e(E, b) = S_{e,Ziegler}(E) \times \frac{\beta^2}{2\pi} e^{-\beta b}$$

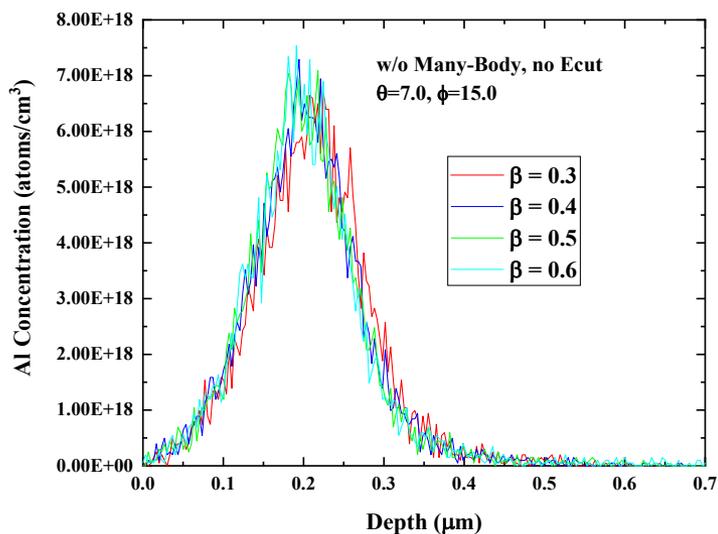
Oen阻止能のβ値が異なってもランダム注入では平均エネルギーロスと同じになるはずだが、平均注入深さに差が出来ていたが、「Oen with many-body」によって改善された。
 4H-SiC 等でもβ値が小さい場合は若干影響があるが改善される。

θ = 7, φ = 60, Se(電子阻止能) 1倍, displacement energy 55 eV, (試料温度は650Kを仮定。Debye温度は1880K)

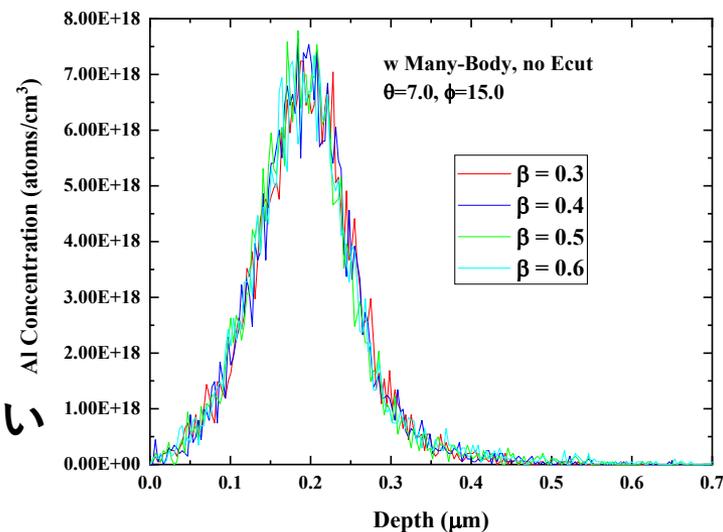
参考 180 keV Al \rightarrow 4H-SiC(0001), $\langle 0001 \rangle$ の場合の β 値による違い

ランダム注入時

最近接原子のみを考慮した計算



第2近接以上の原子からの電子阻止能も考慮した計算 (Se(b) : Oen with Many-Body)



改善したが
もともと差は少ない

SiC 程度の原子間距離だと Many-Body を考慮してもしなくてもそれほど変わらない。ただ β 値が小さい場合は少し変化があるので Many-Body を選択しておく方が良い。