

論文の内容の要旨

論文題目 リチウムドリフト型シリコン半導体検出器の応答関数に関する研究

氏名 後藤俊治

リチウムドリフト型シリコン半導体検出器 (Si(Li)検出器) は、実用化されている汎用のパルス型X線検出器の中でも高いエネルギー分解能を有することから、不純物元素の蛍光X線分析などエネルギー分散型のX線スペクトル測定に幅広く用いられている。しかしながら、Si(Li)検出器を用いて軟X線領域のエネルギー分散型測定を高精度におこなう場合、計測上の問題が主として二点あげられる。その一つは、検出器の前面にあるBe窓、Au電極、Si不感層によるX線の吸収によって低エネルギーになるほど検出効率が減少することであり、特に軽元素のK線の計測などが難しくなる。もう一点は検出器の応答関数の問題である。Si(Li)検出器では、単色X線を計測した際、マルチチャンネルアナライザにおいて、ガウス分布をしたFull energy peakに加えて、その低エネルギー側に連続的な裾引きを伴う。裾引きの一つはFull energy peakに隣接したTailであり、特にフォトンエネルギーが1.84 keV (Si K吸収端) ~ 4 keVの領域ではTailが著しく現れ、Full energy peakの半分程度のチャンネル数において急激に強度が減少する閾値が存在する。また、Tailからつながりゼロチャンネルにかけてほぼ一様に裾を引く成分 (Flat continuum) が観測される。Si(Li)検出器を用いて正確なスペクトル計測する場合、検出器表面の窓による吸収を考慮した単純な感度補正だけでなく、低エネルギー側への裾引きの結果生じるスペクトルの歪みの補正 (デコンボリューション) が必要になる。単に個々の検出器の応答関数を実験的に知り、スペクトル補正をおこなうだけではなく、TailやFlat continuumを減らし、検出器を改善していく上でも応答関数の形成機構に関する理解が必要になるが、これまでの多くの実験や計算機シミュレーションなどによる研究にもかかわらず、裾引きの詳細な形成機構は、完全には明らかになっていなかった。

Si(Li)検出器中で軟 X 線が吸収された場合、光電子と蛍光 X 線、もしくは、光電子と Auger 電子のいずれかの組み合わせで二次的な過程が生じる。蛍光 X 線が発生し、再び検出器において吸収される場合には、さらに光電子、Auger 電子が発生するし、蛍光 X 線が検出器の外に脱出した場合には良く知られている Escape peak となる。光電子や Auger 電子が弾性散乱と非弾性的なエネルギー損失をくり返しながらか検出器中を動き、この際 Si 中を動きまわるとき電子の軌道に沿って電荷キャリアを生成していく。入射光子エネルギーに相当するキャリアがすべて電極に収集される場合には Full energy peak として計数される。本研究では、検出器において X 線が吸収された際、発生する光電子や Auger 電子が検出器の表面電極と Si 領域の境界付近を動き回りエネルギーを失うことにより結果的に光子エネルギーに満たない数の電荷キャリア (電子・正孔対) しか生成しない直接エネルギー損失過程と、一旦生成したキャリアがドリフト・拡散しながら検出器の表面近傍において再結合して失われる拡散・再結合過程の二つの過程に着目し、これらが低エネルギー側への裾引きの主な原因であると考えた。図 1 は検出器表面近傍において X 線が吸収された後に起こり得る諸過程を定性的に 9 種類に分類したものである。 η は拡散・再結合過程によって決まる電荷キャリアの収集効率、 d_{Au} は Au 電極の厚さ、 d_{CD} は完全な Si 不感層の厚さ、 d_{PA} は部分的に有感な Si 領域の厚さを表す。また、 R_{max}^{Au} 、 R_{max}^{Si} は Au、および Si における電子の飛程の最大値である。(a) の過程は電子が Au 電極やキャリア収集効率が 0 の Si 領域でのみエネルギーを失い、単純に X 線が吸収されたとみなせるが、(b)~(d-4) の過程ではキャリア収集効率は 0 でない領域において電子がエネルギーを損失するため何らかの応答関数へ寄与することになる。特に、(b)~(d-1) の過程は決して光子エネルギー相当のキャリアを生成し得ないことから Tail もしくは Flat continuum に寄与するものと考えられる。

図 1 に示したような過程を具体的に調べるにはモンテカルロ法が直接的かつ有効である。モンテカルロ法によって (1) Au 電極もしくは Si 領域において X 線が吸収される深さ、(2) 光電子、Auger 電子もしくは蛍光 X 線の種類、エネルギー、および放出方向、(3) 弾性散乱による電子の散乱方向、(4) 弾性散乱からつぎの弾性散乱までの電子の平均自由行程とその間の連続減速近似によるエネルギー損失について計算することができる。このような電子の単一散乱モデルに基づく一連の電子のエネルギー損失量 (キャリア生成量) を計算し、これにキャリア収集効率を乗じて電子の軌道にそって積算することによって、1 個の光子に関するキャリア収集量を計算する。これを適当な光子数について試行し、ヒストグラムに蓄積することによって応答関数が得られる。

モンテカルロ計算において重要な点の一つは、いかに精度よく電子の固体内での振る舞いを模擬し、エネルギー損失過程を追跡するかである。この点に関しては、低エネルギー領域および重元素において精度が良くないと指摘されている Rutherford 散乱公式に基づく弾性散乱断面積の代わりに、電子線リソグラフィ、光電子分光、Auger 電子分光などの分野のシミュレーション手法としては半ば常識である部分波展開法を用いて計算した弾性散乱断面積を導入することにより精度を改善した。部分波展開法により計算された断面積はデータベース等からの入手が容易でなく、独自に計算コードを作成し断面積を計算した。この断面積を用いることの妥当性は H-J. Fitting により実験的に求められた電子の飛程と、その実験条件に対応したモンテカルロ計算結果を比較することによって検証し、100 eV 程度の低エネルギー領域の電子の Au などの重元素における飛程でも良く一致することを確認した。

応答関数を計算する上で重要なもう一つの点は、いかにして検出器表面近傍におけるキャリア収集効率 η を定量化するかである。Si(Li)検出器の電荷キャリア収集効率のキャリア生成位置(深さ)依存性を定量的に理解するため、キャリア連続の方程式と初期・境界条件を設定し、連続の方程式の解を求めた。連続の方程式は、基本的にはドリフト項と拡散項からなる。初期条件は任意の深さ z_0 においてデルタ関数的にキャリアが生成するものとした。また、Au電極とSiの境界においてドリフトと表面再結合の競合からなる境界条件を設定した。連続の方程式(二階の偏微分方程式)の解をまず解析的に求め、検出器の厚さより十分厚い領域における空間積分をおこない、時間無限大の極限をとることにより電極に収集される確率をキャリア生成位置の関数として求めた。これは最終的に、

$$\eta(z_0) = 1 - \frac{s}{s+v} \exp\left(-\frac{vz_0}{D}\right) = 1 - (1-R) \exp\left(-\frac{z_0}{d_{PA}}\right) \quad (1)$$

の極めて簡単な形式に導くことができる。ここで、 s は表面再結合速度であり、 v はドリフト速度である。また、 D はキャリアの拡散係数である。 $R = v/(s+v)$ は、いわばキャリア反射率ということができ、ドリフトと表面再結合の競合によってきまる量である。 $s = \infty$ のときにはAu電極とSiの界面においてキャリア収集効率は0となる。また、 s が有限なときには界面に近づくほどキャリア収集効率は減少するが、Au電極とSiの界面においてもキャリア収集効率は0にはならず0~1の間の値をとる。 $s = 0$ の極端な場合には界面においてもキャリア収集効率は1となる。このことが本モデルの特徴である。 $d_{PA} = D/v$ は部分的有感領域(キャリア収集効率が0~1となる領域)の厚さを特徴づけ、拡散とドリフトの競合によりきまる量である。一方、 z_0 が十分大きければ収集効率は1になる。

図2は応答関数の測定結果と計算結果を比較したものである。測定は、高エネルギー加速器研究機構フォトンファクトリーのビームラインBL-17AおよびBL-17Cにおいておこない、単色化されたシンクロトロン放射光をコリメートし検出器の最大計数率よりも十分強度を下げて測定した。モンテカルロ計算においてはAu電極の厚さ20 nm、キャリア反射率0.45、部分的有感領域の特性厚さ90 nmを用いた。測定結果と計算結果が非常に良く一致していることがわかる。特に、図1に示した諸過程が応答関数にどのように寄与しているかを明確に示すことができ、低エネルギー側への連続的な裾引きは、図1の(b)~(d-1)の過程において生じていることが確認できた。Tailの閾値はキャリア反射率に関連して存在し、Tailの高さは部分的有感領域の厚さによりきまっていることがわかった。ゼロチャンネル近傍におけるFlat continuumの存在はAu電極にX線が吸収された後の過程(図1(b))が主として寄与していることがわかった。また、Full energy peakと裾引きを含めた積分検出効率はBe窓とAu電極のX線透過率におおむね一致することがわかった。

以上のように、検出器表面近傍における電荷キャリアの収集効率を解析的に導出し、Au電極やSi領域において発生した光電子、Auger電子のエネルギー損失過程をモンテカルロ法によって詳細に追跡するよってSi(Li)検出器の軟X線領域における応答関数と検出効率に関してより詳しい知見を得ることができた。これにより、エネルギー分散型のスペクトル計測においてより正確な応答関数によるデコンボリューションを可能にした。このような計算手法は、他の半導体材料、電極材料を有する半導体検出器や超伝導トンネル接合検出器におけるX線吸収後のエネルギー損失過程を追跡し、詳細な応答関数を計算することにも応用でき、検出器の材料、形状、表面電極処理に対して有用な指針を与えるものである。

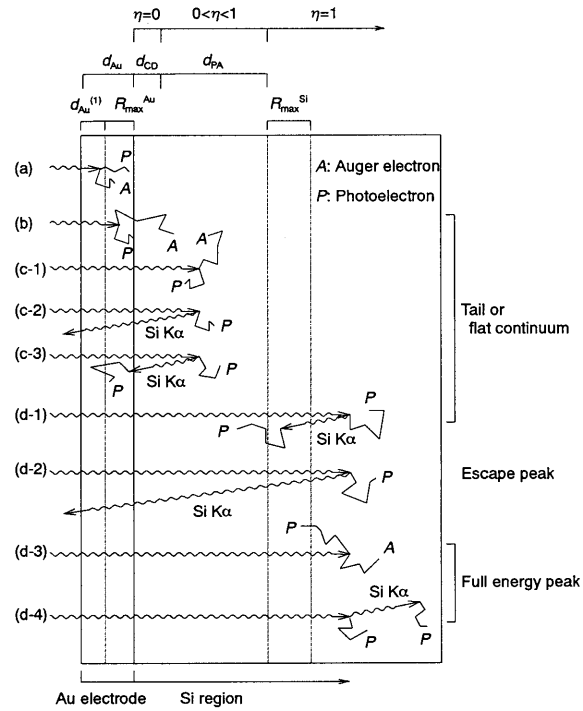


図 1. Si(Li) 検出器の表面近傍において起こり得る X 線吸収後の諸過程

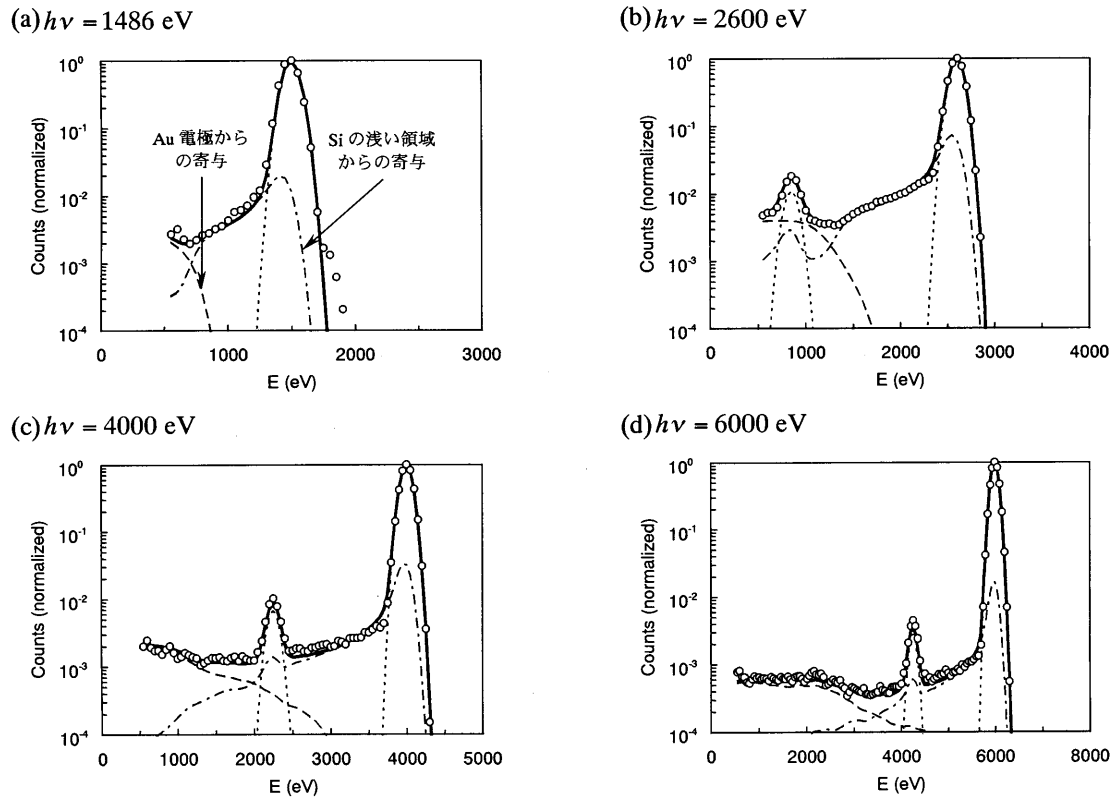


図 2. Si(Li) 検出器の応答関数の測定結果とモンテカルロ計算の比較. 図において, 破線: Au 電極からの寄与, 一点鎖線: Si の浅い領域からの寄与, 点線: Si の深い領域からの寄与, 太線: 全体の和, 白丸: 測定結果を表す.