

# SRIMfit 入門

(半導体照射試験用)

SRIMfitを半導体照射試験に利用される方向けの入門コースです。

(目標)

主に以下の SRIMfit 関数の使い方を習得してください。

- 基本関数 `srE2Rng()`, `srRng2E()`, `srE2LETt()`, `srLETt2E()`
- 組合せ関数 `srEnew()`, `srEold()`

## Update Log :

2022.09/14 ver 1.00 初版

2020.11/04 ver 0.01 未完 `srEnew`の解説まで

# SRIMfit 入門

## 目次

### (1) SRIM と SRIMfit 、 E $\leftrightarrow$ Range 変換関数

(1a) srE2Rng( ) , srRng2E( ) を使ってみる

(1b) srE2Rng( ) の 例題

(1c) srRng2E( ) の 例題

### (2) SRIMfit 基本関数 の種類

(2a) 基本関数 の 例題-1 MySRIMwb 内容表示

(2b) 基本関数 の 例題-2

### (3) 便利な関数: srEnew( ) $\leftrightarrow$ srEold( )

(3a) srE2Rng( ) , srRng2E( ) を使って srEnew( ) , srEold( ) を記述する

(3b) srEnew( ) , srEold( ) 関数の引数について

(3c) srEnewGas( ) , srEoldGas( ) 関数の引数について

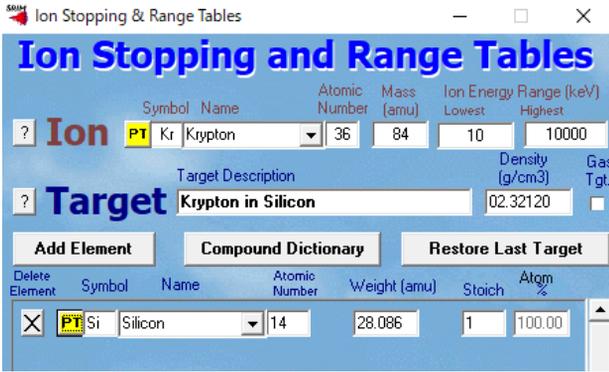
(3d) srEnew( ) , srEnewGas( ) の 例題

(3e) srEold( ) , srEoldGas( ) の 例題

(3f) srEnew( ) , srEold( ) の 総合例題

### (4) おわりに

# (1) SRIM と SRIMfit、E ⇔ Range 変換関数



SR Calculation: SRIM Outputs\Krypton in Silicon.txt

Bragg Correction = 0.00%  
 Stopping Units = MeV / (mg/cm2)  
 See bottom of Table for other Stopping units

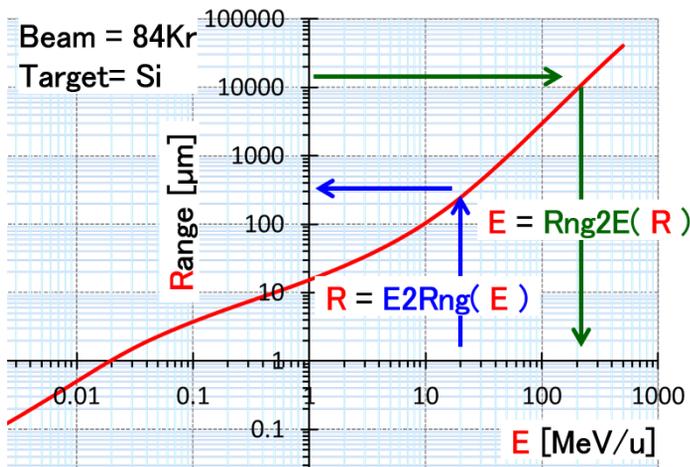
Ion Energy	dE/dx Elec.	dE/dx Nuclea	Projected Range	Longitudinal Straggling	Lateral Straggling
10.00 keV	4.101E-01	4.307E+00	120 A	43 A	33 A
11.00 keV	4.301E-01	4.417E+00	127 A	45 A	34 A
12.00 keV	4.492E-01	4.516E+00	134 A	47 A	36 A
13.00 keV	4.676E-01	4.606E+00	141 A	49 A	38 A
14.00 keV	4.852E-01	4.688E+00	148 A	51 A	39 A
15.00 keV	5.023E-01	4.764E+00	155 A	53 A	41 A
16.00 keV	5.187E-01	4.833E+00	161 A	55 A	43 A

Print Close

ご存知の様に SRIM-2013 コードの Ion Stopping and Range Tables は、  
 ビーム核種(例 Kr) と、標的材質(例 Si) 及びビームのエネルギー(E)を決めると、  
 「その E に於ける、dE/dX (LET), Range (飛程)などの値」を計算して出力してくれます。  
 つまり、**変換関数 from E to Range :  $R = E2Rng(E)$**  ; 連続関数(理論式)  
 を内部に持っています。

一方、SRIMfit ユーザーマニュアルで説明した様に、  
 SRIMfit は、上記 SRIM-2013コードの出力表を読み込み、例えば E と Range の場合、  
 「ある E に於ける Range を、離散的な出力表に従って、直線補間して求める」  
**変換関数 from E to Range :  $R = E2Rng(E)$**  ; 離散データ点から内挿補間版  
 という愚直な機能しかありません。理論式は入っていません。

しかしながら、この単純な直線補間法を用いることで、  
 **$E2Rng()$  の逆関数 from Range to E :  $E = Rng2E(R) = E2Rng^{-1}(E)$**  ; 離散点から内挿補間版  
 も簡単に作るすることができます。



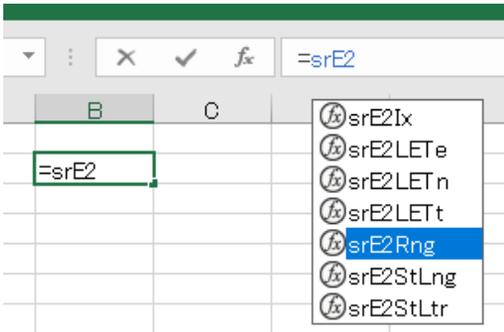
E - Range の関数形は、  
 単調増加関数なので、  
 直線補間がしやすいです。

## (1a) srE2Rng(), srRng2E() を使ってみる

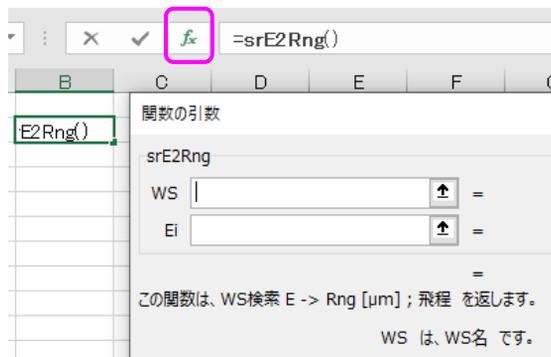
SRIMfit「ユーザーズマニュアル:関数一覧表」に、srE2Rng() と srRng2E() 関数の説明があります。その関数へ渡す引数と、関数からの戻り値 の型 に注意して表を見て下さい。

SRIMfit Function List(1) 基本関数				
<b>&lt;&lt;変数・戻り値 型&gt;&gt;</b>				
	I	Integer		V 型関数のエラー戻り値
	D	Double	#NUM!	xlErrNum 2036 引数の値が不適當
	B	Boolean	#N/A	xlErrNA 2042 表範囲外、計算中エラー
	S	String		
	V	Variant型		Excelエラーも返す
<b>&lt;&lt;変数名 表記&gt;&gt;</b>			<b>&lt;&lt;Private変数名 表記&gt;&gt;</b> WS操作関連で主要なもの	
WS	S	SRIMoutput WorkSheet名	C1m*	WS内の行番号
E, Eu	D	Beam Energy [MeV/u]	Row*	WS内の列番号
Et	D	Beam Energy [MeV]	MySRwbNow	ユーザーが指定した Workbook
R	D	Range [ $\mu$ m]	MySRwsNow	関数が参照中の Current Sheet pointer

戻り値型	関数名	引数名	型	引数の説明	関数の説明	戻り値	戻り値条件	理由など
<b>WS検索(2) E &lt;-&gt; Range</b>								
V,D	srE2Rng				WS検索 E -> Rng [ $\mu$ m] ; 飛程			
	WS	S		WS名	#NUM!	E<0		
	E	D		Beam E [MeV/u] 検索値	#N/A			E がWS範囲外 (>Emax)
					=0	E=0		
V,D	srRng2E				WS検索 Rng ; 飛程 -> E [MeV/u]			
	WS	S		WS名	#NUM!	Rng<0		
	Rng	D		Range [ $\mu$ m] 検索値	#N/A			RngがWS範囲外 (>Rmax)
					=0	Rng=0		



まず、空のセルに 数式 を書いてみます。  
 =srE2  
 まで書くと「関数名候補が表示」されます。  
 srE2Rng を選択し Tab キーで確定  
 します。



関数ヘルプを表示するには、  
 fx アイコンをクリック  
 してください。  
 この関数へ渡すべき引数 の説明が表示されます。

## (1b) srE2Rng() の例題

「SRIMfit入門\_半導体照射試験用.xlsx: ex01 シート」に、srE2Rng() を用いた例題を示しました。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q
1																	
2			SRIMfit 解説: 半導体照射試験用														
3			[ex01] srE2Rng() 使用例														
4																	
5																	
6																	
7																	
8																	
9																	
10																	
11																	
12																	
13																	
14																	
15																	
16																	
17																	
18																	
19																	
20																	
21																	
22																	
23																	
24																	
25																	
26																	
27																	

青字の部分に「値」を入力してください。  
紫字は、数式の結果です。  
緑字が、マクロ関数の計算結果です。

WS name	head	ビーム	材質
srim84Kr_Al	srim	84Kr	Al
WS = head & Bm & "_" & Trg	head	Bm	Trg

E beam MeV/u	Range μm
70	1452.0
95	2400.4
E	R = srE2Rng( WS, E )

関数の引数

srE2Rng

WS \$C\$6 = "srim84Kr\_Al"

Ei D10 = 70

= 1452

この関数は、WS検索 E -> Rng [μm] ; 飛程 を返します。

Ei は、Beam E [MeV/u] 検索値 です。

上図例の計算結果から、

ビーム = 84Kr で、コリメータ材質 = Al の場合、  
ビームエネルギーが 70 MeV/u なら、コリメータの厚さは 1.452 mm 以上  
ビームエネルギーが 95 MeV/u なら、コリメータの厚さは 2.400 mm 以上 必要  
という事がわかります。

### 【解説】

- SRIMfit関数に渡す WS : WorkSheet名 を決めるために必要なパラメータ指定欄です。  
ビーム核種を ①a に、ビームが照射される標的材質を ①b に、青字セルの部分に文字列で記入。
- 関数に渡す WS : WorkSheet名 (MySRIMw.xlsのシート名) を決めます。  
WS名の命名基準は、"srim" & "ビーム核種名" & "\_" & "材質名" となっています。  
紫字のセルには、これを自動生成するための数式が書いてあります。  
数式を、そのセルの脇に記述しておきますので、ご参照ください。
- 関数に渡す E : ビームエネルギー [MeV/u] を指定します。  
青字のセルに、数値を記入します。
- 指定した WS名、ビームエネルギーの場合の、飛程 Range [μm] が表示されます。  
緑字のセルには、srE2Rng() 関数を呼び出す  
' = srE2Rng( WS, E ) ' という数式が書いてあります。

## (1c) srRng2E() の例題

「SRIMfit入門\_半導体照射試験用.xlsm: ex02 シート」に、srRng2E() を用いた例題を示しました。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O		
1																	
2		SRIMfit 解説: 半導体照射試験用											青字	の部分に「値」を入力してください。			
3		[ex02] srRng2E() 使用例											紫字	は、数式の結果です。			
4																緑字	が、マクロ関数の計算結果です。
5																	
6																	
7																	
8																	
9																	
10																	
11																	
12																	
13																	
14																	
15																	
16																	
17																	
18																	
19																	
20																	
21																	
22																	
23																	
24																	
25																	
26																	
27																	
28																	
29																	

関数の引数

srRng2E	
WS	C19 = "srim84Kr_Si"
Ri	D23 = 200
	= 17.17920556

この関数は、WS検索 Rng ; 飛程 -> E [MeV/u] を返します。

Ri は、Range [μm] 検索値 です。

数式の結果 = 17.17920556

上図例の計算結果から、

ビーム = 84Kr で、照射チップ材質 = Si の場合、

不感層の厚さが 200 μm なら、加速器のビームエネルギーは 17.2 MeV/u 以上

不感層の厚さが 800 μm なら、加速器のビームエネルギーは 44.6 MeV/u 以上 が必要  
という事がわかります。

### 【解説】

- ① WS 名 を決めるために必要なパラメータ指定欄です。  
青字 のセルに、文字列を記入します。
- ② 関数に渡す Thk : 不感層の厚さ [μm] を指定します。  
青字 のセルに、数値を記入します。
- ③ 指定した WS名、厚さの場合の、ビームエネルギー [MeV/u] が表示されます。  
緑字 のセルには、srRng2E() 関数を呼び出す  
‘ = srRng2E( WS, Thk ) ’ という数式が書いてあります。

## (2) SRIMfit 基本関数 の種類

SRIMfit「ユーザズマニュアル」で説明してあるように、SRIMfitのマクロ関数は、MySRIMwb.xlsxにあるデータシートを読んで計算をしてその結果を返します。

SRIMfitの基本関数(例:前述のsrE2Rng()やsrRng2E())は、このデータシートに書いてある値を参照する関数などです。ここでは、データシートに書いてある事について説明します。

The screenshot shows a spreadsheet titled "SRIMfit" data table. It contains various parameters and data for SRIM simulation. Key sections include:

- SRIM ver= SRIM-2013.00** (circled 2)
- Target= Si** (circled 2)
- SRIM E range** (circled 3): Emin= 20, Emax= 228
- SRIM Stor** (circled 4): E/dx Elec, dE/dx Nucl, dE/dx tot
- Power Unit = [MeV/(mg/cm2)]** (circled 4)
- Projected Range** (circled 5): Range values in micrometers
- Longitudinal Straggling** (circled 6a) and **Lateral Straggling** (circled 6b): Straggling values in micrometers
- LET value display unit conversion table** (circled 7): Table with columns for unitID, Onv. Factor, and ThisV Sname

①	上図例のシート名は srim84Kr_Si = (ビーム 84Kr, 標的物質 Si) 用のものです。	
	値の説明	関連する SRIMfit関数名
②	ビームと標的物質に関連する情報	srInfoIonZ(), srInfoTrgDens(), etc.
③	ビームのエネルギー: E に対する...	srMinE(), srMaxE(), etc.
④	LET値 (dE/dX) electric, nuclear	srE2LETt(), srLETt2E(), srMaxLETt(), etc.
⑤	Range値 (飛程)	srE2Rng(), srRng2E()
⑥a,b	Straggling 値 ビーム方向、垂直方向	srE2StLng(), srE2StLtr(), srStLng2E(), etc.
⑦	LET値表示の単位換算表	srLETUNm(), srLETcnvF(), etc.

※ それぞれの関数の使い方については、「ユーザズマニュアル」SRIMfitの関数一覧(1),(2)を参照してください。

## (2a) 基本関数の 例題-1 MySRIMwb 内容表示

「SRIMfit入門\_半導体照射試験用.xlsm: ex03 シート」に、SRIMfit 基本関数 を用いた例題を示しました。

SRIMfit 解説: 半導体照射試験用										青字 に「値」を入力									
[ex04] 基本関数の 使用例(1)										紫字 数式の結果									
[ex04] MySRIMwb 内容表示										緑字 マクロ関数の結果									
ご自分の MySRIMwb.xlsx の確認用です																			
WS.name = <b>srim84Kr Air</b> WS ← MySRIMwb.xlsx ブック中の WorkSheet名を入力																			
Corded <b>Ayoshida.RIKEN 2016.06</b> <small>srInfoWScorded(WS)</small>										Gas? Gas == Target Composition ==									
SRIM ver <b>SRIM-2013.00</b> <small>srInfoVer(WS)</small>										Atom Atm Atomic Mass Multiply Stopping by , for Stopping Units									
Ion Z <b>36</b> <b>Kr</b> <small>srInfoIonZ(WS), srElemNm(WS)</small>										ix Name Num Nm [%] [%] Uid Cnv. Factor									
Ion A <b>84</b> <small>srInfoIonA(WS)</small>										0 C 6 0.02 0.02 1 1.20E-02 eV/A									
Target <b>Air</b> <small>srInfoTrgName(WS)</small>										1 O 8 21.08 23.18 2 1.20E-01 keV/um									
Air (Dry ICRU-104(gas)) <small>srInfoTrgNameL(WS)</small>										2 N 7 78.43 75.51 3 1.20E-01 MeV/mm									
Tgt.Dens <b>1.20E-03</b> e/cm3 <small>srInfoTrgDens(WS)</small>										3 Ar 18 0.47 1.29 4 1.00E+00 keV/(ug/cm2)									
4 <b>4.89E+19</b> atoms/cm3 <small>srInfoTrgDensA(WS)</small>										5 1.00E+00 MeV/(mg/cm2)									
Bragg Crct. <b>0.00%</b> <small>srInfoBragC(WS)</small>										6 1.00E+03 keV/(mg/cm2)									
										7 2.42E+01 eV/E15 atoms/cm2)									
										8 4.90E-02 L.S.S.									
Table Range Min Max										sum 100.0 100.0 0 == 5 : MeV/(mg/cm2)									
E [MeV/u] <b>1.07E-05</b> <b>1.00E+03</b> <small>srMinE(WS), srMaxE(WS)</small>										<small>srInfoTgCmAtmNm(WS,ix)</small>									
Rng [μm] <b>5.36E+00</b> <b>1.98E+08</b> <small>srMinRng(WS), srMaxE(WS)</small>										<small>srInfoTgCmAtmNm(WS,ix)</small>									
Long.Strg [μm] <b>1.72E+00</b> <b>7.38E+06</b> <small>srMinStLng(WS), srMaxStLng(WS)</small>										<small>srInfoTgCmAtmNm(WS,ix)</small>									
Late.Strg [μm] <b>1.24E+00</b> <b>4.21E+05</b> <small>srMinStLr(WS), srMaxStLr(WS)</small>										<small>srInfoTgCmAtmNm(WS,ix)</small>									
dE/dx unitID <b>0</b> = 0.1 . 8 Uid										<small>srInfoTgCmMasPot(WS,ix)</small>									
LETtotal LETelec LETnucl in unitID <small>srMaxLET(e,n)(WS,Uid)</small>										Log-Log 表示									
at E = <b>1.190</b> <b>1.190</b> <b>0.00083</b> <small>srMaxLET(e,n)2E(WS)</small>										Lin-Lin 表示									
LETo 70% <b>33.97</b> <b>33.88</b> <b>4.986</b> <small>LET% * MaxLET(e,n)</small>										②a									
Elow side <b>0.294</b> <b>0.298</b> <b>0.00008</b> <small>srLET(e,n)2E(WS,LET%,Uid)</small>										②b									
Ehigh side <b>11.253</b> <b>11.303</b> <b>0.00575</b> <small>srLET(e,n)2E(WS,LET%,Uid)</small>																			
② <b>10.0</b> = Emin [MeV/u] (Lin-Lin プロット) 確認用																			
③ <b>1.0</b> = Estep																			
E [MeV/u] <b>3.207E+01</b> <b>1.744E-02</b> <b>3.209E+01</b> <b>2.258E+05</b> <b>7.560E+03</b> <b>1.479E+03</b>																			
E <small>srE2LEt(WS,E,0)</small> <small>srE2LEt(WS,E,0)</small> <small>srE2Rng(WS,E)</small> <small>srE2StLng(WS,E)</small>																			
<small>srE2LETn(WS,E,0)</small> <small>srE2Rng(WS,E)</small> <small>srE2StLr(WS,E)</small>																			
10.00 3.584E+01 2.133E-02 3.586E+01 1.731E+05 5.584E+03 1.388E+03										②a									
11.00 3.433E+01 1.990E-02 3.435E+01 1.930E+05 6.378E+03 1.394E+03										②b									
12.00 3.286E+01 1.813E-02 3.287E+01 2.137E+05 7.141E+03 1.446E+03																			
13.00 3.145E+01 1.690E-02 3.147E+01 2.354E+05 7.889E+03 1.504E+03																			
14.00 3.013E+01 1.583E-02 3.014E+01 2.581E+05 8.629E+03 1.571E+03																			
15.00 2.889E+01 1.489E-02 2.889E+01 2.818E+05 9.368E+03 1.632E+03																			
16.00 2.771E+01 1.407E-02 2.773E+01 3.064E+05 1.011E+04 1.700E+03																			
17.00 2.663E+01 1.333E-02 2.664E+01 3.321E+05 1.086E+04 1.772E+03																			
18.00 2.562E+01 1.266E-02 2.563E+01 3.587E+05 1.162E+04 1.841E+03																			
19.00 2.468E+01 1.207E-02 2.470E+01 3.864E+05 1.238E+04 1.916E+03																			
20.00 2.384E+01 1.153E-02 2.385E+01 4.152E+05 1.316E+04 2.000E+03																			
21.00 2.306E+01 1.104E-02 2.308E+01 4.450E+05 1.394E+04 2.084E+03																			
22.00 2.238E+01 1.061E-02 2.239E+01 4.760E+05 1.512E+04 2.170E+03																			
23.00 2.175E+01 1.020E-02 2.176E+01 5.077E+05 1.662E+04 2.259E+03																			
24.00 2.115E+01 9.805E-03 2.116E+01 5.398E+05 1.815E+04 2.349E+03																			
25.00 2.069E+01 9.474E-03 2.069E+01 5.738E+05 1.965E+04 2.446E+03																			
26.00 2.020E+01 9.144E-03 2.021E+01 6.078E+05 2.154E+04 2.543E+03																			
27.00 1.976E+01 8.827E-03 1.977E+01 6.422E+05 2.320E+04 2.642E+03																			
28.00 1.944E+01 8.558E-03 1.945E+01 6.782E+05 2.473E+04 2.746E+03																			
29.00 1.912E+01 8.290E-03 1.913E+01 7.143E+05 2.627E+04 2.851E+03																			

このシートは、SRIMfitが読み込んでいる MySRIMwb.xlsx の内容を表示します。(縮小図で見ずらくてすみません)

### 【解説】

- WS名を 青字 文字列で指定します。  
ここだけを指定すると、シートのほぼ全ての内容が表示されます。
- 右端のグラフ ②a ②b : X,Y=Lin, Lin表示 の範囲を 青字 で指定。  
SRIMfitが行っている“内挿補間”が、デコボコになっていないかを確認するのに便利です。
- ビームエネルギーを 青字 で指定して、LET, Range, Straggling の値を表示させる。

## (2b) 基本関数の 例題-2

「SRIMfit入門\_半導体照射試験用.xlsx: ex04 シート」に、SRIMfit 基本関数 を用いた例題を示しました。

1	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O
2	SRIMfit 解説: 半導体照射試験用										青字	に「値」を入力			
3	[ex04] 基本関数 の 使用例(2)										紫字	数式の結果			
4											緑字	マクロ関数の結果			
5	[ex04] ビーム選び														
6	試験に用いる重イオンビームで、														
7															
8															
9	Q. 試験可能な LETの範囲は？														
10															
11	A. ワークシート名(ビーム核種+照射材質)を指定して、														
12	基本関数を使って LET 値を表示する。														
13															
14															
15	WS name		→		ビームA	ビームZ									
16	①	srIm84Kr Si			84	36	②a								
17		WS			= srInfoIonA( WS )										
18					= srInfoIonZ( WS )										
19					標的の名	標的密度	②b								
20	LET 値表示の単位指定				Si	2.32									
21		Uid番号	単位名		= srInfoTrgName( WS )										
22	③a	0	MeV/(mg/cm2)		= srInfoTrgDens( WS )										
23		Uid	= srLETUNm( Uid )												
24											LET 値の単位について ③b				
25					Uid	単位名	変換係数								
26					0	MeV/(mg/cm2)	1.0	← 核物理、半導体照射用							
27					1	eV/A	232	← 材料照射用							
28					2	keV/um	232.1	← 生物照射用							
29					3	MeV/mm	232.1								
30					4	keV/(ug/cm2)	1.0								
31					5	MeV/(mg/cm2)	1.0								
32					6	keV/(mg/cm2)	1000.0								
33					7	eV/1E15 atoms/cm2	46.6								
34					8	L.S.S.	0.1								
35								= srLETUNm( Uid ) = srLETOnvF( WS,Uid )							
36	最大LET値とその時のビームエネルギー														
37					→	maxLET( total )	E @ maxLET								
38						MeV/(mg/cm2)	MeV/u	④a	④b						
39						41.00	@	2.14							
40						= srMaxLETt( WS, Uid )									
41						= srMaxLETt2E( WS )									
42	ビームエネルギー → LET 値														
43		Ebeam	LET 値( total )	LET	LET										
44		MeV/u	MeV/(mg/cm2)	electric	nuclear										
45		70.0	→	9.47	9.470	0.004									
46		2.1	→	40.93	40.848	0.080									
47		E	= srE2LETt( WSE,Uid )												
48			⑥a	= srE2LETe( WSE,Uid )											
49				= srE2LETn( WSE,Uid )											

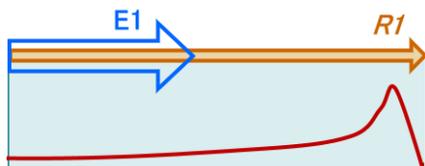
- ① WS名を 青字 文字列で指定します。
- ② WS名 から、②a ビーム情報、②b 標的情報 を表示。
- ③ LET値の単位を ③a に 青字 で指定。③b に、他の単位系への変換係数を表示。
- ④ ビーム核種と標的材質が決まると、最大LET値 ④a は、一意に決まります。  
 ←「これ重要」なので、覚えておいてくださいね！ ビームエネルギーには無関係です！  
 その最大LET値になるビームエネルギーを ④b に表示。  
 ← つまり、このエネルギー以上ならば、最大LET値で照射可能という事です！
- ⑤ 次に、ビームエネルギーを 青字 で指定した場合の LET値を計算してみます。
- ⑥ LET\_total ⑥a = LET\_electric ⑥b + LET\_nuclear ⑥c です。  
 半導体照射では、LET\_total を用いることが多いそうです。

### (3) 便利な関数: srEnew() ⇔ srEold()

SRIMfit で、私が一番便利に使っている srEnew() 関数と、その逆関数 srEold() について説明します。これらの関数は、SRIMfit の基本関数 srE2Rng() と、その逆関数 srRng2E() から成る組合せ関数です。

#### (3a) srE2Rng(), srRng2E() を使って srEnew(), srEold() を記述する

ビームのエネルギーが E1 の時、物質中での Range が R1 だったとします。

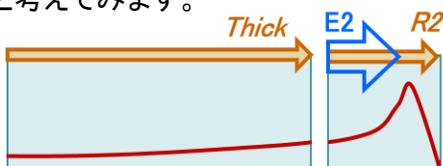


$$R1 = E2Rng( E1 )$$

イメージが分かりやすいように、物質中の  $dE/dX$  (LET) 曲線: Bragg カーブも記載してあります

では、上図を2つに分けて

「ある厚さ Thick を通過して」と「エネルギーが E2 に低下した時の Range は R2」と考えてみます。



$$R2 = R1 - Thick$$

$$R2 = E2Rng( E2 )$$

$$\therefore E2 = E2Rng^{-1}( R2 ) = Rng2E( R2 )$$

図を2つに分けても、ビーム核種とターゲット物質は同じですから、同じ関数形  $R = E2Rng( E )$  で議論できます。

そして E2 は、逆関数  $Rng2E( R2 )$  で求められる事がわかります。

以上まとめると、次の様な2つの拡張関数を簡単につくれる事がわかります。

ビームエネルギー E が、物質 厚さ Thick を通過「後」のエネルギー Enew を求める



WS: Work Sheet Name

```
Enew = srEnew( WS, E1, Thick ) {
  R1 = srE2Rng( WS, E1 );
  R2 = R1 - Thick ;
  if ( R2 <= 0 ) return( 0 );
  E2 = srRng2E( WS, R2 );
  return( E2 ); }
```

ビームエネルギー E が、物質 厚さ Thick を通過「前」のエネルギー Eold を求める



```
Eold = srEold( WS, E1, Thick ) {
  R1 = srE2Rng( WS, E1 );
  R2 = R1 + Thick ;
  E2 = srRng2E( WS, R2 );
  return( E2 ); }
```

※ SRIMfit マクロ定義の中では、実際にこのように記述してあります。

※ 以上、まわりくどい説明でしたが、これは Range の定義式と、定積分の区間和則から明らかです。

$$R1 = \int_0^{E1} \frac{dE}{(dE/dx)} = \int_0^{E2} \frac{dE}{(dE/dx)} + \int_{E2}^{E1} \frac{dE}{(dE/dx)} = R2 + Thick$$

但し、ここで言う Range は「投影飛程:projected range」で、ビーム入射方向に沿って計った飛程です。重イオンビームの場合、物質中のイオン経路は殆ど曲がらないので、イオンが実際に動いた距離である「経路長」と、「投影飛程」はほぼ等しくなります。ダメな例は、物質中の電子飛程など。Ref) 現代工学社 放射線計測の理論と演習 上巻 § 4.7.3

### (3b) srEnew(), srEold() 関数の引数について

SRIMfit「ユーザーズマニュアル:関数一覧表(2a) 組合せ関数」に、  
 固体用: srEnew() と srEold() 関数の説明があります。以下に転記します。

《変数名 表記》		《eq.関数で、戻値が err: #N/Aになる場合》	
WS1,WS2	S 比較するWS名	case-1)	Eu10 > Emax 表範囲外
Eu	D Beam Energy [MeV/u]	case-2)	Eu11 < 0 Eu20 や Th2 が不定になる為
Et	D Beam Energy [MeV]	case-3)	Et11 > Et20 Bm1の通過後Eが、Bm2 通過前の全E より大きい
dEu	D Beam Energy Loss [MeV/u]	case-5)	dEt1 > Et20 Bm1のdEt が、Bm2 通過前の全E より大きい
dEt	D Beam Energy Loss [MeV]	case-8)	WS1 の Rng( E ) 表の範囲外
Tum,Tmm	D Thickness [μm]   [mm]	case-9)	WS2 の Rng( E ) 表の範囲外
Pa	D Gas Pressure [Pa]	case-11)	dEpeak search error
dgC	D Gas Temperature [degC]	case-12)	dEu2max < dEu1 解なし
		case-14)	dE2ixE search error

カテゴリー	戻値型	関数名	引数名	型	引数の説明	関数の説明	戻値	戻値条件	理由など
-------	-----	-----	-----	---	-------	-------	----	------	------

#### 組合せ関数(2) equivalent E <-> Rng 計算

V,D	srEnew	戻値	説明
WS	S	WS名	Trg厚 Th[μm] 通過後の Beam E [MeV/u] ; Enew
Eu10	D	Bm 通過前 E [MeV/u]	#NUM! Eu10<=0 Th1<0も許可
Th1	D	Trg 厚 [μm]	#N/A -Th >Rmax =0 Eu10=0   Th1>=Rng(Eu10) =Eu10 Th1=0
			=srEold(Eu11,Th1) Th1<0 Eold 計算と同等

関数の引数	通過前		通過後	
	Eold MeV/u	Thick μm	Enew MeV/u	Eu11 戻値
WS1	Eu10	Th1	Eu11	
戻値	引数	引数	引数	戻値

```

(等価計算式)
srEnew(WS,Eu10,Th1) {
  R10= srE2Rng(WS,Eu10)
  if((R11= R10 - Th1)<=0) return( 0 )
  E11u= srRng2E(WS,R11)
  return( E11u )
}
    
```

組合せ関数の説明では、参考の為、**《等価計算式》** を C言語 like に示しました。  
 VBA エディタで、それぞれの関数スクリプトをご覧になるとわかるように、  
 この等価計算式と同様な処理+エラーハンドリング が記述されています。

V,D	srEold	戻値	説明
WS	S	WS名	Trg厚 Th[μm] 通過前の Beam E [MeV/u] ; Eold
Eu11	D	Bm 通過後 E [MeV/u]	#NUM! Eu11<=0   Th1<0 不許可
Th1	D	Trg 厚 [μm]	#N/A E1>=Emax =Eu11 Th1=0
			=srRng2E(Th1) Th1=0 & E11=0

関数の引数	通過前		通過後	
	Eold MeV/u	Thick μm	Enew MeV/u	Eu11 戻値
WS1	Eu10	Th1	Eu11	
戻値	戻値	引数	引数	

```

srEold(WS,Eu11,Th1) {
  R11= srE2Rng(WS,Eu11)
  R10= R11 + Th1
  Eu10= srRng2E(WS,R10)
  return( Eu10 )
}
    
```

標的のある厚さを《通過後》のエネルギー値 《Enew》  
 逆に  
 標的のある厚さを《通過前》のエネルギー値 《Eold》  
 を計算する関数です。後述のように  
 Gas標的版(温度、気圧を指定)もあります。

### (3c) srEnewGas(), srEoldGas() 関数の引数について

SRIMfit「ユーザーズマニュアル:関数一覧表(2b) 組合せ関数 Gas用」に、  
 気体用: srEnewGas() と srEoldGas() 関数の説明があります。以下に転記します。

《変数名 表記》			《_eq_関数で、戻値が err: #N/A になる場合》		
Tmm	D	Thickness [mm]	#NUM!	WS<>Gas	WSがGasTrgでない
Pa	D	Gas Pressure [Pa]	その他は _eq_() 関数と同じ。		
dgC	D	Gas Temperature [degC]			
その他は _eq_() 関数と同じ。					

Gas用関数の場合、  
**厚さ Th は [mm] 単位で指定** します。  
 更に、それぞれの気体の **気温 [degC]** と **気圧 [Pa]** も指定 してください。

それ以外は、Gas 用でない関数と、計算方法・結果は同じです。

#### 組合せ関数(2) equivalent E <-> Rng 計算

V,D	srEnewGas	GasTrg厚 Th[mm] 通過後の Beam E [MeV/u] ; Enew
WS	S	WS(Gas)名
Eu10	D	Bm 通過前 E [MeV/u]
Tmm1	D	GasTrg 厚 [mm]
Pa1	D	GasTrg 気圧 [Pa]
dgC1	D	GasTrg 気温 [°C]
		#NUM! WS<>Gas WSがGasTrgでない
		#NUM! Eu10<=0 Th1<0も許可
		#N/A -Th >Rmax
		=0 Eu10=0   Th1>=Rng(Eu10)
		=Eu10 Th1=0
		=srEold(Eu11,Th1) Th1<0 Eold 計算と同等

関数の 引数 戻値	通過前			通過後		
	Eold MeV/u	Thick mm	Pa	°C	Enew MeV/u	
WS1	Eu10	Tmm1	Pa1	dgC1	Eu11	
引数	引数	引数	引数	引数	戻値	

(等価計算式)

```
srEnewGas(WS,Eu10,Tmm1,Pa1,dgC1) {
  Th1= Tmm1 * 1000 * srThkStd(WS,Pa,dgC)
  R10= srE2Rng(WS,Eu10)
  if((R11= R10 - Th1)<=0) return( 0 )
  E11u= srRng2E(WS,R11)
  return( E11u )
}
```

V,D	srEoldGas	GasTrg厚 Th[mm] 通過前の Beam E [MeV/u] ; Eold
WS	S	WS(Gas)名
Eu11	D	Bm 通過後 E [MeV/u]
Tmm1	D	GasTrg 厚 [mm]
Pa1	D	GasTrg 気圧 [Pa]
dgC1	D	GasTrg 気温 [°C]
		#NUM! WS<>Gas WSがGasTrgでない
		#NUM! Eu11<=0   Th1<0 不許可
		#N/A E1>=Emax
		=Eu11 Th1=0
		=srRng2E(Th1*srThkStd(Pa1,dgC1)) Th1=0 & E11=0

関数の 引数 戻値	通過前			通過後		
	Eold MeV/u	Thick mm	Pa	°C	Enew MeV/u	
WS1	Eu10	Th1	Pa1	dgC1	Eu11	
引数	戻値	引数	引数	引数	引数	

```
srEoldGas(WS,Eu10,Tmm1,Pa1,dgC1) {
  Th1= Tmm1 * 1000 * srThkStd(WS,Pa,dgC)
  R11= srE2Rng(WS,Eu11)
  R10= R11 + Th1
  Eu10= srRng2E(WS,R10)
  return( Eu10 )
}
```

### (3d) srEnew(), srEnewGas() の例題

「SRIMfit入門\_半導体照射試験用.xlsm: ex05 シート」に、srEnew(), srEnewGas() を用いた例題を示しました。

1	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R		
2	SRIMfit 入門: 半導体照射試験用										青字	に「値」を入力								
3	[ex05] srEnew() 使用例										紫字	数式の結果								
4											緑字	マクロ関数の結果								
5	[ex05] 物質通過”後”のエネルギー																			
6	空气中照射で、試料表面のLET値を調整したい																			
7																				
8																				
9	Q. Edeg板の厚さはいくらにすべきか？																			
10	A. srEnew() を使い、下流方向に順次Eを計算。																			
11	目標のLET値になるように																			
12	Edeg板厚を”手動で”変化させる。																			
13																				
14																				
15	ビーム	材質		WSname																
16	84Kr	Kapton	膜	srim84Kr_Kapton																
17	Bm	Air	空気	srim84Kr_Air																
18		Al	Edeg	srim84Kr_Al																
19		Si	試料	srim84Kr_Si																
20		Trg	WS		E真空中															
21					[MeV/u]															
22	気圧	気温																		
23	[hPa]	[°C]																		
24	1020.5	21.0																		
25	Pair	Tair																		
26																				

- ① ビーム核種とビームが通過する材質名を①aに指定し、それぞれのWS名①bを用意しておきます。
- ② ビームが通過する空気の気温と気圧を入力。
- ③ 真空中でのビームエネルギー（加速器からのエネルギー）を入力。
- ④ 各ビーム通過物の厚さを④a～④dを入力。
- ⑤ 各通過物を“通過後”のビームエネルギーを、srEnew()とsrEnewGas()関数を用いて計算し、結果を表示しています。通過物が固体の場合はsrEnew()を、気体の場合はsrEnewGas()を使います。表下側に、各セル中に記述した式を書いてありますので、よく見て下さい。Ebm → E1 → E2 → E3 → E4 の順でエネルギーの変化を計算しています。簡単でしょう？！通過する材質によって、WS名の参照値①bを変えている事にも注意して下さい。最後のE4が、空気層2(Lair2)通過後つまり、照射試料表面位置でのエネルギーになります。
- ⑥ 試料表面でのLET値を、srE2LETt()を用いて算出しています。

では、“手動”で Edeg板の厚さ④cをいじってみて下さい。

Edeg板の厚さ④c	vs	試料表面LET値⑥
0.0 μm	→	10.12 = これがEdeg無しの最小LET値です。
1220.0 μm	→	40.79 = Kr vs Si材のmaxLET=41 Bragg Peak 近傍です。
1235.0 μm	→	19.05 = Bragg Peak を超えて、LETが減少する領域です。
1250.0 μm	→	#N/A = 計算エラー E4= 0.0 となり、ビームが試料手前で停止しています。

### (3e) srEold(), srEoldGas() の例題

「SRIMfit入門\_半導体照射試験用.xlsx: ex06 シート」に、srEold(), srEoldGas() を用いた例題を示しました。

1	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T	U	
2	SRIMfit 入門: 半導体照射試験用										青字	に「値」を入力										
3	[ex06] srEold() 使用例										紫字	数式の結果										
4											緑字	マクロ関数の結果										
5	[ex06] 物質通過“前”のエネルギー																					
6	空气中照射で、試料表面のLET値を指定したい。試料表面にはモールド層がある。																					
9	Q. 必要な加速器ビームエネルギーは？																					
10	A. srEold() を使い、目標のLET値から																					
11	”上流に遡って”、真空中のエネルギーを計算する。																					
13	①a		①b		③a		③b		③c		③d		③e		④b							
15	ビーム	材質	WSname			Kapton	Air	Epoxy	SiO2	Cu	maxLET											
16	84Kr	Kapton	膜	srim84Kr_Kapton	真空膜	空気層1	Mold1	Mold2	Mold3	maxLET												
17	Bm	Air	空気	srim84Kr_Air	50.0	145.0	100.0	50.0	10.0	LET指定												
18		Epoxy	Mold1	srim84Kr_Epoxy	真空中	Tkap	Lair1	Tm1	Tm2	Tm3	LET											
19		SiO2	Mold2	srim84Kr_SiO2	[MeV/u]	通過前	通過前	通過前	通過前	通過前	E試料表面											
20		Cu	Mold3	srim84Kr_Cu	72.70	72.70	71.82	69.62	67.03	65.61	64.73											
21		Si	試料	srim84Kr_Si	Ebm	E6	E5	E4	E3	E2	E1											
22	②		Trg	WS	⑥		⑤															
23			="srim" & Bm & "_" Trg		maxLET= srMaxLETt(WS試料,0) E1= srLETt2E( WS試料, LET, 0, 1) E2= srEold( WSMold3, E1, Tm3 ) E3= srEold( WSMold2, E2, Tm2 ) E4= srEold( WSMold1, E3, Tm1 ) E5= srEoldGas( WS空気, E4, Lair1, Pair*100, Tair ) E6= srEold( WSM膜, E5, Tkap ) Ebm = E6																	
24	気圧	気温																				
25	[hPa]	[°C]																				
26	1020.5	21.0																				
27	Pair	Tair																				

- ①, ② ビーム核種、材質名を ①a に、空気の気圧、気温を ② に指定。WS名 ①b が用意されます。
- ③ 各ビーム通過物の厚さを ③a ~ ③e に入力。
- ④ 試料表面での LET 値を ④a に指定。指定値は、最大LET値 ④b 以下である事。srLETt2E() 関数を用いて、そのLET値になるビームエネルギー E1 ④c が計算されます。
- ⑤, ⑥ 各通過物を“通過前”のビームエネルギーを、srEold() と srEoldGas() 関数を用いて計算し、結果を表示しています。最後の E6 が、真空膜 通過前 つまり、加速器からのビームエネルギー Ebm ⑥ になります。

では、“手動”で LET指定 ④a をいじってみて下さい。

LET指定 ④a	vs	真空中 Ebm ⑥	
10.0	→	72.70 MeV/u	LET値指定が小さいと、Ebmは高くなります。
40.0	→	25.40 MeV/u	maxLET近傍(少し手前)にするには、このエネルギーで可能です。
41.0	→	#N/A	= 計算エラー maxLET = 40.998 なので、このビームと照射試料では、このLET値を指定できません。

### (3f) srEnew(), srEold() の総合例題

「SRIMfit入門\_半導体照射試験用.xlsx: ex07 シート」に、本コースのまとめとなる例題を示しました。

1	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T
2	SRIMfit 入門: 半導体照射試験用									青字	に「値」を入力									
3	[ex07] srEnew() srEold() のまとめ									紫字	数式の結果									
4										緑字	マクロ関数の結果									
5	[ex07] Edeg厚さ“自動”計算																			
7	最上流の、真空中のビームエネルギーが決まっている。																			
8	最下流の、試料表面LET値も指定した場合、																			
9	Q. Edeg厚さを計算するには？																			
10	A. Edegの入口、出口に於ける“Range”を比較する。即ち、																			
11	上流からEdeg入口まで順次 Enew() 計算した E を Range変換した値:R1 と、																			
12	下流からEdeg出口まで順次 Eold() 計算した E を Range変換した値:R2 の																			
13	差: R1-R2 が Edeg厚である。																			
15	①a			①c			①d			②b										
16	Beam	材質	WSname	Kapton	Air	Al	真空膜	空気層1	Edeg板	空気層2	試料表面	maxLET								
17	Bm	Air	srim84Kr_Kapton	膜	Air	Al	[μm]	[mm]	[μm]	[mm]	LET指定	40.998								
18		Al	srim84Kr_Air	空気	Al		50.0	145.0	742.4	200.0	15.00	maxLET								
19		Si	srim84Kr_Al	Edeg	Si						LET									
20		Trg	srim84Kr_Si	試料	WS						E試料表面									
21	①b			②a			③a			③b										
22	気圧	気温	WS	E真空中	通過後	通過後	通過後	通過前	Edeg入口でのRange	通過前	E試料表面									
23	[hPa]	[°C]	= "srim" & Bm & "_" Trg	[MeV/u]	E01	E02	R02	E12	1346.1	E11	35.74									
24	1020.5	21.0		Ebm	69.07	66.85		R12		R12	603.67									
25	Pair	Tair																		
26	⑤ 検算									表面LET(検算)										
27																				
28	E01= srEnew( WS膜, Ebm, Tkap )									R02= srE2Rng( WSEdeg, E02 )									maxLET= srMaxLETt(WS試料,0)	
29	E02= srEnewGas( WS空気, E01, Lair1, Pair*100, Tair )									R12= srE2Rng( WSEdeg, E12 )									E11= srLETt2E( WS試料, LET, 0, 1)	
30	E03= srEnew( WSEdeg, E02, Tal )									Tal = R02 - R12									E12= srEold( WS空気, E11, Lair2 )	
31	E04= srEnewGas( WS空気, E03, Lair2, Pair*100, Tair )																			
32	LET= srE2LETt( WS試料, E04, Uid=0 )																			

- ① 照射環境パラメータを①a~①dに記入。
- ② 上流拘束:真空中のビームエネルギーを②aに、下流側高速:表面LET値を②bに記入。
- ③ 上流~Edeg入口までの計算が③a、下流~Edeg出口までが③bです。  
Edeg入口でのエネルギー E02 を、“Edeg材質中”での Range R02 に変換、出口では E12 と R12 です。
- ④ 求めるべき Edegの厚さは、上記 R02 と R12 の Rangeの差です。  
つまり、Tal = R02 - R12 です。 ←(3a)項の説明を見直してください。
- ⑤ 求めた Tal を用いて、再度上流から srEnew() 計算をして検算を行っています。  
表面LET(検算)が、②bで指定した表面LET値と同じ値になっている事を確認して下さい。

では、LET指定②bの値をいじってみて下さい。

LET指定 ②b	vs	Edeg板厚さ Tal ④	
15.0	→	742.4 μm	
40.0	→	1206.0 μm	maxLET近傍(ギリギリ手前)にするには、この厚さです。
10.0	→	-33.1 μm	厚さがマイナス値になるのは、「Edeg使用不可」です。 E真空中を上げる or ビーム通過物を薄くする 必要があります。

## (4) おわりに

本コースは以上で終わりです。SRIMfitが、半導体照射試験用の計算ツールとして便利な事を理解して頂けたでしょうか。SRIM2013は業界標準コードですが、この計算結果を用いてExcelマクロ関数化したことにより、より便利な計算ツールとなりました。特に、Enew() Eold()は便利で、これが欲しかったので、私はSRIMfitを作りました。

掲載してある例題: パーツを利用して、自分なりの「照射試験用チェックシート」を構築して頂けると幸甚です。その時に、「計算式を間違えない様に！」指定してくださいね。このコースで紹介した例題をよく見直し、自分で理解してから改造してみてください。

### (注意)

SRIMfitは、ビーム調整用の「単なる計算ツール」「目安」である事を忘れずに！

実際のビーム調整や半導体試験では、この計算通りになるとは限りません。

その理由は沢山あります。

#### (実験的誤差)

- ビーム通過物の「厚さ」と「密度」の測定誤差。照射物、通過物の設置精度。
- 加速器からの真空中エネルギーの測定誤差
- 当チーム担当のエネルギー検出器の較正誤差 ... etc ...

#### (計算誤差)

- SRIM2013計算において標的が化合物の場合、その元素組成比や、密度、混合の不均一性などによって誤差が生じます。また、「Bragg補正項」の指定方法が、私も良く理解していません。
- SRIMfit に入力する MySRIMwb の内挿補間に於ける計算誤差。 ... etc ...

#### (物理誤差)

- そもそも SRIM2013の「理論計算」にも、ビーム核種、標的核種によって数%の誤差があります。

ref) <http://www.srim.org/SRIM/History/HISTORY.htm> Historical Review: Theories for Stopping & Ranges of Heavy Ions ;  
*Stopping powers in 2003 (the date of this chapter) can now be calculated with an average accuracy of about 5% overall, 6% for heavy ions and better than 2% for high velocity light ions.*

- またビームの Range Stragglng効果により、Range は幅を持った量です。つまりLET値にも幅が生じます。  
SRIM計算結果の“値”は、幅を持った分布の”中心値”である事に注意して下さい。

これら諸々の誤差を十分考慮の上で、

「安全方向に考えたLET値調整」をするように心掛けて下さい。

理研仁科・産業チーム:あ吉田