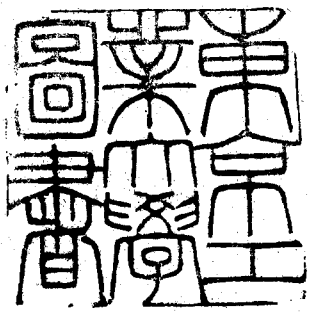
T2R2 東京科学大学 リサーチリポジトリ
Science Tokyo Research Repository

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	イオン注入法を用いた半導体素子製作に関する研究
Title(English)	
著者(和文)	石原宏
Author(English)	HIROSHI ISHIWARA
出典(和文)	学位:工学博士, 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第614号, 授与年月日:1973年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:
Citation(English)	Degree:Doctor of Engineering, Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第614号, Conferred date:1973/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:
学位種別(和文)	博士論文
Type(English)	Doctoral Thesis

Powered by T2R2 (Science Tokyo Research Repository)

イオン注入法を用いた
半導体素子製作に関する研究



昭和４８年１月

指導教官　古川静二郎　助教授

提出者　大学院博士課程電子工学専攻

石原　宏

1973, 2, 6

内容梗概

イオン注入法に関する物理現象，とくに多層構造基板中に打込まれたイオンの空間分布を明らかにし、イオン注入法を用いて半導体素子を製作する場合の最適打込み条件を求めることを目的とした研究である。

まず，半導体素子の性能，形状に対する社会的要請について述べ，半導体への不純物導入技術としては、従来の熱平衡状態下の現象を用いた熱拡散法では、これらの要請を満たす素子を再現性良く製作することが難しく，イオンビームを用いた不純物導入技術（イオン注入法）が必要なことを述べた。

単一層基板中のイオン分布の分散に関して，理論値が，実験値よりも小さくなるという不一致について検討を行ない、工学上有用な分布を求めるためには、基礎方程式を2階微分方程式に展開する必要のあることを示した。

つぎに、半導体表面に酸化膜層などの付いた多層構造基板に注入されたイオンの空間分布を求めるために，基板中のイオンのエネルギー分布に基づいて、イオンの空間分布を求める解析法を提案し、従来の解析法との比較から、その妥当性を明らかにした。この解析法を用いて、層の境界面で、イオンのエネルギー分布が連続するという仮定の下に多層構造基板中のイオン分布を求め、境界面でイオン濃度分布に段ができることなどの結論を導いた。この結論の物理的解釈に基づいて、SiO_2－Si基板などに適用できる近似解析法を導き、2層構造基板へのイオン注入を必要とするMOSFETのゲート閾値電圧制御のための最適打込み条件を明らかにした。また，Heイオンの後方散乱法を用いて，2層構造基板中のイオン分布を測定し、理論解析が、ほぼ妥当であることを明らかにした。

さらに、イオン注入時に発生する格子欠陥分布を、イオンのエネルギー分布に基づいて理論的に導き、Si基板に重いイオンを打込んだ場合には，イオン濃度が最大となる深さよりも約1/3だけ表面側に格子欠陥密度が最大となる位置があること、欠陥分布の形状が、報告されている実験値と良く一致することなどの結論を導いた。

目　次

第1章	序　論	1
1.1	半導体素子製作技術に対する社会的要請	1
1.2	新しい半導体製作技術の現状と可能性	5
1.2.1	イオン注入法	5
1.2.2	Physical Vapor Deposition	10
1.2.3	電子ビーム露光およびイオンビームエッチング	10
1.3	半導体素子製作技術としてのイオン注入法	12
1.3.1	打込み条件	13
1.3.2	打込み装置	17
1.4	イオン注入法の素子製作への応用例	21
1.4.1	Si基板への応用例	23
1.4.2	化合物半導体および半導体以外の物質への応用例	32
1.4.3	格子欠陥を利用した素子製作	34
1.5	本研究の目的と意義	37
1.5.1	イオン注入法に関する研究の歴史的経過と本研究の意義	37
1.5.2	本研究の目的と進め方	40
第2章	イオン注入法にともなう物理現象	43
2.1	核阻止能と電子阻止能	44
2.1.1	核阻止能	47
2.1.2	電子阻止能	54
2.2	非晶質基板中のイオンの飛程分布	58
2.3	単結晶基板中のイオンの飛程分布 ―チャンネリング効果―	63

2.4	アニール処理	68
第3章	モーメント展開を用いた飛程分布の理論解析	72
3.1	解析の仮定および基礎方程式	74
3.1.1	解析の仮定	74
3.1.2	基礎方程式	76
3.2	微分方程式を用いた解法の精度に関する検討	81
3.2.1	飛程およびエネルギーに関する規格化量の導入	82
3.2.2	飛程分布の精度に関する検討	85
3.2.3	射影飛程分布の精度に関する検討	89
3.3	高次モーメントの影響	99
3.3.1	飛程分布の高次モーメントの導出	100
3.3.2	実験結果との対応	105
3.4	本章のまとめ	109
第4章	打込みイオンのエネルギー分布に基づく飛程分布の理論解析	111
4.1	基板中におけるイオンのエネルギー分布の導出	113
4.1.1	解析の仮定	113
4.1.2	微少距離進んだ後のイオンのエネルギー分布	115
4.1.3	多重衝突後のイオンのエネルギー分布	122
4.2	単一元素基板中の飛程分布	127
4.2.1	解析の妥当性に関する検討	127
4.2.2	Thomas-Fermi ポテンシャルを用いた飛程分布の計算	134
4.3	化合物基板中の飛程分布	138
4.4	本章のまとめ	142

第5章	多層構造基板中の飛程分布の理論解析	145
5.1	イオンのエネルギー分布に基づく解析法	147
5.1.1	SiO_2 - Si および SiO_2 - GaAs 基板中のイオン分布の定性的検討	147
5.1.2	SiO_2 - Si 基板中のイオン分布の定量的検討	151
5.2	多層構造基板中の射影飛程分布に関する近似解析法	154
5.2.1	近似解析法の導出	154
5.2.2	SiO_2 - Si , Al_2O_3 - Si , Si_3N_4 - Si 基板中のイオンの射影飛程分布	160
5.3	MOSFETのゲート閾値電圧制御のための最適打込み条件	165
5.4	本章のまとめ	173
第6章	格子欠陥分布に関する理論解析	175
6.1	格子欠陥分布の導出法	178
6.1.1	解析の仮定	179
6.1.2	イオンが基板原子に与えるエネルギー分布	181
6.1.3	格子点を外れた原子により作られる欠陥	185
6.2	単一層基板中の格子欠陥分布	187
6.2.1	計算例	187
6.2.2	実験結果との対応	193
6.3	多層構造基板中の格子欠陥分布	196
6.4	基板が非晶質となる限界注入量のイオン種依存性	202
6.4.1	解析の仮定および限界注入量を与える式の導出	203
6.4.2	Si 基板に対する非晶質限界注入量	206
6.4.3	Si 以外の基板に対する非晶質限界注入量	210
6.5	本章のまとめ	211

第7章	多層構造基板中の射影飛程分布に関する実験的検討	213
7.1	荷電粒子の後方散乱法を用いた不純物原子分布の測定	216
7.1.1	後方散乱法に用いるイオンの種類および工ネルギー	217
7.1.2	後方散乱法の原理	219
7.2	実験装置および実験方法	223
7.2.1	実験装置	223
7.2.2	実験方法	233
7.3	測定試料の製作	235
7.3.1	陽極酸化	235
7.3.2	イオン注入	238
7.4	測定結果	240
7.4.1	エネルギー分解能の決定	240
7.4.2	測定系の分解能を考慮した理論スペクトルと実験値との比較	248
7.4.3	2層構造基板中の注入イオン分布	252
7.5	測定系の分解能の影響を減らすための実験条件	256
7.6	本章のまとめ	260
第8章	格子欠陥のアニール特性に関する実験的検討	262
8.1	チャンネリング効果を用いたHeイオンの後方散乱法	264
8.2	実験方法および測定試料	266
8.2.1	実験方法	266
8.2.2	測定試料	270
8.3	Heイオンの後方散乱スペクトルの測定	271
8.3.1	格子欠陥領域のアニール特性	271
8.3.2	格子欠陥の逆アニール現象	275

8.4 電気的性質のアニール特性との比較 279
8.4.1 電気的性質の測定方法および測定試料 279
8.4.2 電気的性質のアニール特性 282
8.5 本章のまとめ 284

第9章 結論 286

謝辞 292
参考文献 293
本研究に関する発表文献 320
付録 324

記号表**

$a = 0.8853 a_0 (Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}})^{-\frac{1}{2}}$	遮蔽距離*
a_0	Bohr 半径
$b = 1/\sqrt{\pi \cdot \delta R \cdot N}$	各々の基板原子の占める領域の半径*
$C = \langle R \rangle / \delta R$	
C_0	光速
$C_E = 4\pi\varepsilon_0 a M_2 / Z_1 Z_2 q^2 (M_1 + M_2)$	エネルギーの規格化量*
C_{ox}	酸化膜層の単位面積当りの容量
$C_R = \pi a^2 \gamma$	飛程の規格化量*
d	表面層の厚み
$d\sigma = d\sigma_n + d\sigma_e$	微分衝突断面積*
$d\sigma_e$	イオンと電子との微分衝突断面積*
$d\sigma_n$	イオンと原子核との微分衝突断面積*
$e = 2.7183$	自然対数の底
E	イオンのエネルギー
E'	衝突後のイオンのエネルギー
E_0	イオンの打込みエネルギー
$E_c = (S_n^0/k)^2$	$S_n = S_e$ を満たすエネルギー
E_l	イオンのエネルギー分布の下限
E_u	イオンのエネルギー分布の上限
$f = -2t^{3/2} d\sigma_n / \pi a^2 dt$	イオンと原子核との相互作用ポテンシャルから定まる関数
F	イオンのエネルギー分布関数
F_m	基板中を $m \cdot \delta R$ 進んだイオンのエネルギー分布関数
G	格子点を外れた基板原子のエネルギー分布関数

* 基板が複数の元素から成立っているときは，これらの量には添字 i を付けて，区別する。

** 本表には，第6章までに行なった理論的検討に用いられた記号を示す。

h	プランク定数
$\hbar = h/2\pi$	
I	飛程分布の厳密解に含まれる定積分
$k = Se/\sqrt{E}$ *	
l	衝突径数
m_e	電子の静止質量
M_1	打込みイオンの質量
M_2	基板原子の質量 *
n	イオン濃度
N	単位体積中の基板原子数 *
$N_\square$	単位面積当りの打込みイオン数
$N_\square'$	2層構造基板の第2層中に打込まれる単位面積当りのイオン数
n_v	格子欠陥密度
N_v	格子欠陥数
p	飛程分布関数
P_i	化合物基板中で，イオンが元素iの周囲領域に入射する確率
q	単位電荷
r	イオンと基板原子核との距離
R	飛程
$\langle R \rangle$	平均飛程
$\langle R_c^2 \rangle = \langle R_p^2 \rangle + \langle R_\perp^2 \rangle$	
R_p	射影飛程
$\langle R_p \rangle$	平均射影飛程
$\langle R_r^2 \rangle = \langle R_p^2 \rangle - \langle R_\perp^2 \rangle / 2$	
$\langle R_\perp^2 \rangle$	イオンの射影飛程の動径方向の2次モーメント

R_{max}	最大イオン濃度を与える深さ
$\Delta = C_E S_n / C_R$	—
$S_e = \int T_e d\sigma_e$	電子阻止能*
$S_n = \int T_n d\sigma_n$	核阻止能*
S_n^0	r^{-2} ポテンシャルを仮定した場合の核阻止能*
$t = C_E^2 E T_n / \gamma$	
$T = T_e + T_n$ *	
T_d	基板原子の変位エネルギー
T_e	軌道電子に与えるエネルギー*
T_n	核に与えるエネルギー*
$T_{n,max} = \gamma E$	核に与える最大エネルギー*
$\langle T_n \rangle_s$	薄層通過中のイオンが周囲原子核に与える平均エネルギー
V	イオンの速度
$v_0 = q^2 / 4\pi\varepsilon_0 \hbar$	
V_T	MOSFETのゲート閾値電圧
$y = t / \varepsilon^2$	
z	基板表面に垂直な座標軸
$Z = (Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}})^{\frac{3}{2}}$ *	
Z_1	打込みイオンの原子番号
Z_2	基板原子の原子番号*
$\beta = V / C_0$	
$\gamma = 4M_1M_2 / (M_1 + M_2)^2$ *	
$\Gamma = \langle \Delta R_p \rangle / \langle R_p \rangle$	
δ	デルタ関数
δR	基板中に仮定した薄層の厚さ

$\langle \Delta R \rangle$	飛程の標準偏差
$\langle \Delta R_p \rangle$	射影飛程の標準偏差
ΔV_T	ゲート閾値電圧の変化
$\varepsilon = C_E E$	規格化エネルギー
ε_0	真空中の誘電率
ξ	衝突後のイオンのエネルギーの規格化値
$\xi_e \approx Z_1^{1/6}$	電子阻止能に表われる定数
$\eta_1 = M_3 / M_2^{3/2}$	
$\eta_2 = M_4 / M_2^2 - 3$	
$\eta_3 = M_5 / M_2^{5/2} - 10\eta_1$	
$\lambda_2 = 0.326$	r^{-2} ポテンシャルに対する λ の値
$\mu = M_2 / M_1$ *	
$M_n = \langle (\rho - \langle \rho \rangle)^n \rangle$	
ν	核衝突に消費されるエネルギー
$\rho = C_R R N$	規格化飛程
φ	基板原子核との衝突によるイオンの散乱角 *
Ξ_c	非晶質限界注入量
$\Omega_n^2 = \int T_n^2 \, d\sigma_n$	

第1章 序論

1.1 半導体素子製作技術に対する社会的要請

Shockleyによるトランジスタの発明以来、半導体工学は，通信，情報処理応用を目的とした素子の上限周波数の向上，小形化，信頼性の向上，消費電力の低減，および低価格化と，電力応用を目的とした大容量化とを目指して急速な進歩をとげた。

一例として、バイポーラトランジスタの上限周波数について考えると、初期のGeの合金化により製作されたものは、ベース幅が20μm程度あり，高周波遮断周波数f_Tは，約1MHzであったが、今日のマイクロ波トランジスタは，エピタキシャル成長（コレクタ形成），気相拡散（ベース，コレクタ電極形成），固相拡散（エミッタ形成），イオン注入（ベース形成）などの不純物導入技術と、CVD*，フォトエッチング，蒸着などの表面処理技術との組合せで製作されており、ベース幅は0.06μm，f_Tは8GHz以上となった。(1)

一方、電力応用の分野でも、大面積単結晶育成技術と・端部における降服を防ぐ技術的改良により、直径6cm，耐圧2.5kV，電流容量1000Aのサイリスタが製作されている。

これらの例に代表されるように、半導体工学の発展の歴史は、新しい物理現象の発見による発展というよりは、むしろ、半導体製作技術の進歩による発展ということができる。もちろん，トンネルダイオード，ガンダイオードなど、新しい物理現象の発見により製作された素子もあるが、これらの素子は、いずれもその特長を十分に生かすことができる一分野で実用化されているに過ぎず，IC，LSIを始めとする通信，情報処理応用に用いられる大部分の素子、および電力応用に用いられている総ての半導体素子は、Shockley

---

* Chemical Vapor Deposition

の予言した一連の物理現象を、製作技術の進歩により高度に発展させたものと考えることができる。

今日までのこのような半導体工学の発展が、人間社会に果した役割は、"エレクトロニクス時代"という言葉に集約されているといえるが、文明の進歩と共に人間社会の扱う情報量は飛躍的に増加し、超大形計算機の要求、あるいは、ファクシミリ、テレビ電話などの要求として半導体工学へはねかえってきた。このような大量情報システムに対する社会的要請に答えるために、半導体工学が進むべき道は2通り考えられる。

第1の方法は、新しい物理現象に基づくシステムを開発することである。このうち、最もその将来性を期待されているものの一つに、光を用いた情報処理システムがあるが、新しい材料の開発に膨大な基礎研究が必要なことを考えると、近い将来に現在のシステムを総て置き換えることは不可能といってよい。

そこで、第2の方法として、今日までの半導体工学の進歩の過程を踏襲して、半導体製作技術をより高度に発達させ、従来の物理現象を用いた素子の高速化、集積化、および多様化を図ることにより、社会的要請に答える大量情報システムを開発することが考えられる。

ここで、半導体素子の製作技術の進歩を振り返ると、初期の単結晶成長技術、合金化による不純物導入技術から出発して、熱拡散法、エピタキシャル成長法、酸化膜形成、フォト・エッチング技術などの進歩によりもたらされた選択拡散技術、および低温における絶縁層形成技術（CVD）などが、目ざましく発展した。そして、これらの技術に共通な特長は、いずれも、熱平衡状態下の現象を利用した化学的プロセスであるということであり、熱平衡状態の利用は、格子欠陥の少ない単結晶を用いる半

導体工学においては当然のことであった。

しかしながら、近年素子の高速化、集積化、多様化が進むにしたがい、マイクロ波トランジスタの例にみるように、製造過程が複雑になり、熱平衡状態を利用した素子の製作法では、特性の均一化が図れない場合が生じてきた。例えば、熱拡散法を用いて不純物を導入する場合には、半導体表面に自然に形成される酸化膜層の影響、あるいは、結晶中に存在する転位の影響により不純物濃度分布にある程度のばらつきが生じることは避けられない。

簡単な工程で製作できる素子の場合には、これらのばらつきを見込んで設計することにより、歩止りよく特性を規格内に納めることが可能であったが、マイクロ波トランジスタや、IC, LSIのように多数回の不純物導入工程を必要とする素子を製作する場合には、不純物分布のばらつきが、素子の性能に大きく影響し、歩止りよく規格内の性能を持つ素子を製作することが困難になってきた。このように、熱拡散法によって導入された不純物が、表面層や結晶中の転位の影響を受けやすいのは、不純物原子の得る運動エネルギーの絶対値が小さいためと考えることができる。

一方、素子の集積化が進むに従い、不純物原子の運動方向が等方的であることも問題となってきた。すなわち、選択拡散を行なう場合に、深さ方向の接合位置と同程度に、マスクの裏側に不純物原子が回り込む現象による問題であり、この2つの問題は、熱平衡状態の現象を利用した製作法では避けることができない。

同様な現象は、選択拡散を行なう場合のパターンの製作においても見られる。すなわち、現在のフォトエッチング技術は、光を用いているために、パターンの生産限界は、1μm程度であり、エッチング液の回り込み、不純物原子のマスク裏側への回り込みなどを考慮すると、現在製作されているマイクロ波トランジスタのエミッタ幅1.5μm[1]という値は、光を用いたパターン製作技術の限界と考えることができる。さらに現在行なわれている化学エ

ッチの方法では、厚いマスクに小さな窓を正確に開けることは不可能であり、また、エッチング速度が物質によって異なるから、2種類以上の物質からなる多層構造マスクに正確な窓を開けることも難しい。

このように、光と化学エッチ液を用いるホトエッチング技術では、サブミクロンのパターンを製作することが不可能であり、素子の一層の高密度化を図るためには、新しいパターン製作技術が必要となる。

このような要請の下に、半導体素子製作法として近年注目を集めてきたのが、イオンビーム、電子ビームの半導体工学への応用である。この場合、イオンあるいは電子は、熱エネルギーよりもはるかに高いエネルギーで同一方向に加速されるため、熱平衡状態を利用した製作法では、原理的に不可能な素子をも製作できる可能性がある。

事実、イオンビームを用いた不純物の導入法(イオン注入法)は実用化されており、熱平衡状態を利用した熱拡散法、エピタキシャル成長法では製作が困難な素子が製作されている。以下、この新しい製作法の現状と可能性について考える。

1.2 新しい半導体製作技術の現状と可能性

新しい考えに基づく半導体製作技術を従来のものと比較したのが表1-1である。同表の熱非平衡状態を用いた製作法のうち、イオン注入法以外は、まだ実用化には至っていない。以下、各々の技術について、現状と可能性について考える。

1.2.1 イオン注入法

不純物原子をイオン化し、数十～数百keVのエネルギーで加速して半導体中に導入する方法である。

イオン注入法と、他の不純物導入技術との比較を示した表1-2より、イオン注入法の特長をまとめると以下のようになる。

	基板制御技術	不純物導入技術	表面処理技術	パターン製作技術
熱平衡状態	単結晶成長 エピタキシャル成長	熱拡散 エピタキシャル成長 合金化	蒸着 熱酸化 CVD	フォト・エッチング (化学エッチング)
熱非平衡状態		イオン注入	〔PVD〕	〔電子ビーム露光 イオンビーム・エッチング〕

〔 〕 実用化されていない技術

表1-1 半導体製作技術の分類

不純物導入法	物理現象	分類	不純物源	不純物分布決定要素	プロセス最高温度	接合深さ	低濃度不純物の導入
熱拡散法	熱平衡状態	気相拡散	気体 固体	・基板温度 ・不純物温度（固体源） ・拡散時間 ・ガスの種類，流量	800~1300℃	≧1 μm	$10^{17}cm^{-3}$ 以下 困難
		固相拡散	固体	・基板温度 ・拡散時間 ・不純物源中の不純物濃度	800~1300℃	≧0.1 μm	$10^{15}cm^{-3}$ 以下 困難
エピタキシャル成長法	熱平衡状態	気相成長	気体 固体	・基板温度 ・不純物源温度（固体源） ・成長時間 ・ガスの種類，流量	1100~1300℃	1 μm 以下では，エピ層濃度は均一にならない	$10^{13}cm^{-3}$ も可能
		液相成長	溶融体	・基板温度 ・冷却速度 ・成長時間 ・溶融液中の不純物濃度	800~1500℃		
イオン注入法	熱非平衡状態	／	イオン	・打込みエネルギー ・打込み角度 ・打込み量 ・アニール温度 ・打込み速度 ・アニール時間 ・基板温度	400~1000℃	通常 1μm 以下	$10^{14}cm^{-3}$ も可能

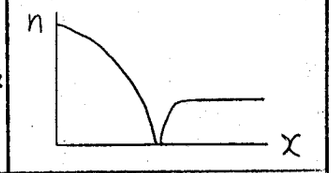
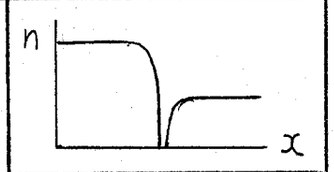
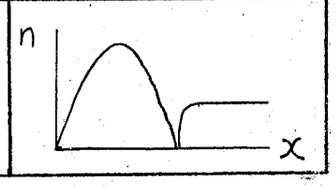
不純物導入法	高濃度不純物の導入	導入される格子欠陥	均一度，再現性	二次元図形	代表的な不純物分布
熱拡散法	固溶度程度	高濃度拡散の場合には多い．	格子欠陥や表面の自然成長酸化膜に影響される．	マスクの端から接合深さと同程度の横方向回り込み．	
エピタキシャル成長法	ヘテロ接合も可能	基板の結晶性に強く影響される．	基板位置により濃度が変化し均一性，再現性は，悪い．	埋めエピタキシャル技術を用いても，図形の大きさは 50~100 μm．	
イオン注入法	新物質の合成も可能	打ち込み時には不純物原子1個に対し1~3000個の格子欠陥が発生する．	適当な条件を選ぶと不純物濃度のばらつきを3%以下にできる．	打ち込みエネルギーを高くすると，横方向回り込みは接合深さの半分以下になる．	

表1-2 イオン注入法と他の不純物導入技術との比較

利点

(1) 打込み条件が定量的に測定できる。

(1-1) 不純物濃度の制御が容易である。(特に低濃度で)

(1-2) 接合位置, 最大不純物濃度の制御性が良い。

(1-3) 再現性, 均一度がよい。

(2) 不純物分布を決定するパラメターが多い。

(2-1) 階段接合に近い不純物分布が得られる。

(2-2) 浅い接合の形成が可能である。

(2-3) 表面を低濃度にすることが可能である。

(3) 低温プロセスが可能である。

(4) マスク端部から裏側へ回り込む不純物の量が少ない。

欠点

(1) 装置が大きく、高圧, 真空など取扱いが複雑である。

(2) 打込み層に欠陥の効果が残る場合がある。

(3) 深い接合を形成するためには, 高電圧の発生装置が必要となる。

(4) 生産能力が拡散法に比べて劣る。

つぎに, 現在の半導体製作技術のうちで、イオン注入法がどのような位置を占めているかを示したのが図1-1である。同図では、不純物導入技術としてのエピタキシャル成長法も、基板制御技術にまとめてある。

同図より、現在イオン注入法が実用化されている分野は、

(1) 複雑な不純物分布を持つ素子 (IMPATTダイオード, M波トランジスタ, VARICAP)

(2) 大面積に均一な浅い不純物導入が必要な素子 (Siビディコン, 放射線半導体検出器)

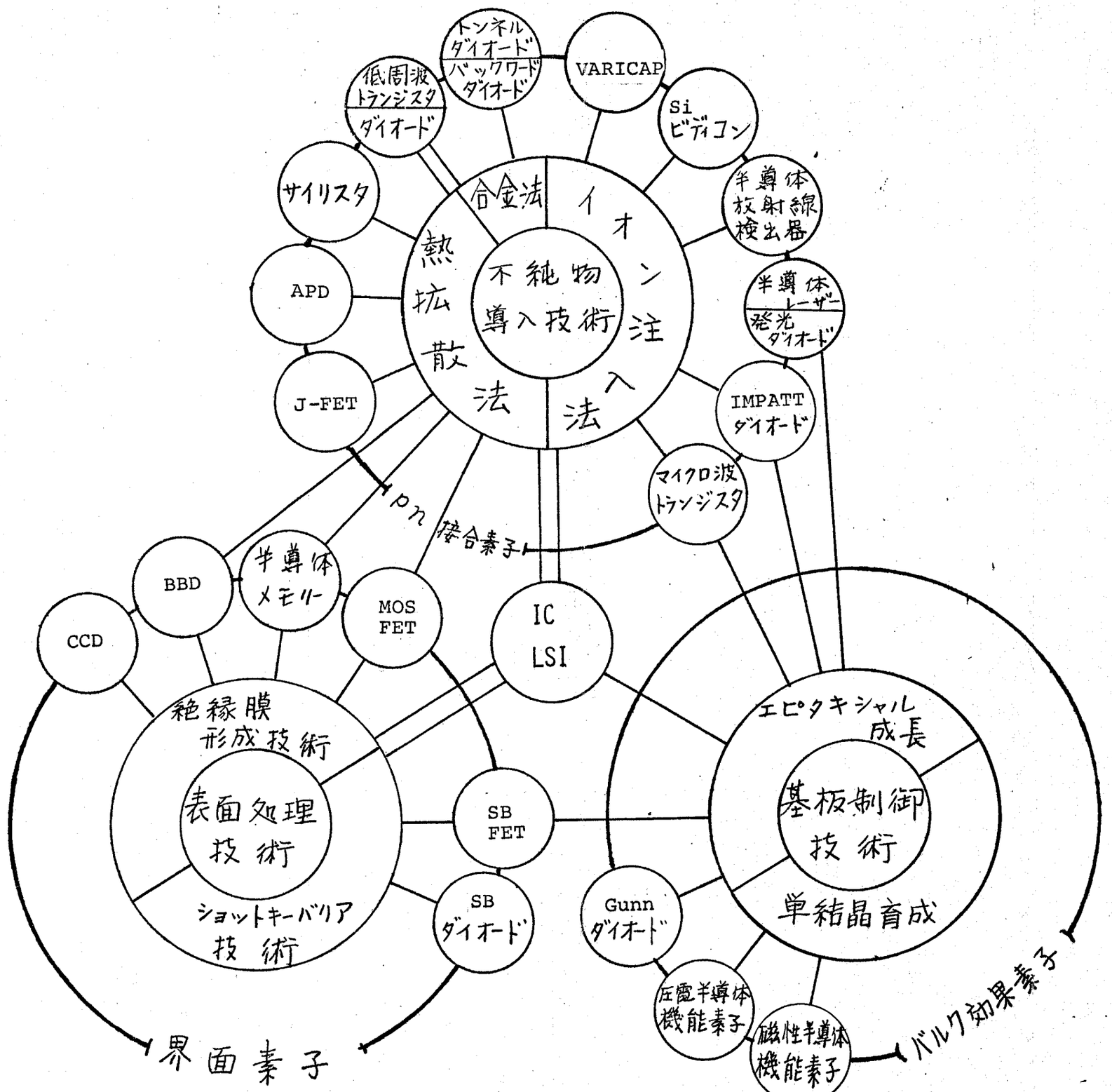


図1-1　半導体素子製作技術の中でイオン注入法の占める位置

(3) 低濃度の不純物を制御よく導入する必要がある素子（IC, 高抵抗）

(4) 不純物の回り込みを少なくする必要がある素子（MOSFET）

などである。

また、イオン注入法が将来他の不純物導入法に置き換る可能性のある分野を以下に示す。

(1) 装置の改良により、大量生産、低価格化が実現した場合。

→特に深い接合を必要とする素子を除いたpn接合素子。

(2) イオン注入に関する物理現象が明らかになった場合。

→GaAs-SBFET, 半導体レーザー, 発光ダイオードなど, 化合物半導体基板を用いる必要のある素子。

このように、イオン注入法は、ほとんどすべての分野にわたる、不純物導入技術として確立する可能性のある技術である。また、電力用サイリスタのように深い拡散を必要とする素子の製作の場合にも、拡散法のプレデイポジションとして用いることにより、特性の均一化を図れる可能性がある。

イオン注入法の打込み条件, 装置, 応用例などについては, 次節以後で述べる。

1.2.2 Physical Vapor Deposition

この技術は、イオンビームを不純物導入法としてではなく、表面層形成法として応用しようとする試みであり、この方法の、CVD, あるいは、他の方法にない特長としては、薄い表面層を均一に、精度良く製作できること、および、純度の高い表面層が形成できることが考えられる。

イオンビームにより表面層を形成した例としては、Si基板に、O, N, C, イオンを打込んで SiO_2, Si_3N_4, SiC を形成したという報告[2]があり、赤外吸収の実験から、新物質の合成が確認されている。この方法の実現のためには、打込みエネルギーは低くても、大電流のとれる装置が必要であり、この意味では、現在のところ必ずしもイオン注入装置が適しているとはいえない。イオン注入装置以外のものを用いたPVDとしては、スパッタリング、グロー放電などのガス・プラズマを用いた方法があり、ガス・プラズマを用いてGaAs表面に絶縁酸化膜層を形成したという報告がある。[3]

1.2.3. 電子ビーム露光およびイオンビームエッチング

現在のパターン形成技術であるフォトエッチング技術では製作することができない、サブミクロンのパターンを形成するために、実用化が望まれているのが、電子ビーム露光技術と、イオンビームエッチング技術である。

光を用いたパターンの製作は、先に述べたように、光の回折のために1μm以下のパターンを精度よく製作することができない。一方、電子ビームの場合には、現在ビーム直径を20~30Å程度までに絞ることが可能であり、イオン注入法との組合せによるサブミクロンパターンを持つLSIの製作も報告されている。[4]

つぎに、イオン・ビームエッチングは、イオンの衝撃による基板原子のスパッタリングを利用してエッチングを行なうもので、現在は、化学エッチ液に犯される糊などで基板に貼りつけられた結晶のエッチング用として、$LiNO_3$トランスジューサーの高周波化などに利用されている。[5] このように、イオンビームエッチは、エッチングの回り込み現象が起らないという利点を持つが，反面，エッチ時に格子欠陥が発生するという欠点があり，実用化のためには，イオンビームにより発生する格子欠陥分布を知ることが重要である。

また、イオンビームを利用したエッチングの別の応用として、イオンビーム衝撃により格子欠陥が多数発生した領域は、化学エッチ液のエッチング速度が速いこと[6]を利用した方法が考えられる。この現象を利用すれば、エッチング速度が等方的にならないから、厚い酸化膜中に幅の狭い窓を開けることも可能と考えられ，また，打込まれたイオンがすべて酸化膜中で止まるようなエネルギーを選ぶことにより基板に対する悪影響は残らない。

以上述べたように、半導体工学へのイオン・ビーム，電子ビームの応用は，半導体素子の均一化，高速化，小形化を図るためには、不可欠な技術ということができ、イオン注入法の実用化につづいて、電子ビーム露光が近い将来実用化される見通しとなってきた。

本論文では、このようなイオンビーム，電子ビーム応用のうち、不純物導入技術として、一部実用化されているイオン注入法をとりあげ、半導体素子製作技術として未解決な問題をいくつか検討した。

1.3 半導体素子製作技術としてのイオン注入法

すでに述べたように，イオン注入法は，目的とする原子をイオン化，加速して，基板に打込む技術であるが，半導体中で、ドナーあるいは、アクセプターとなり得る原子を打込んでも，打込んだままの状態で，置換位置に入り，電気的に活性化される原子の割合は多くない。*

また、一般に、イオン注入時に発生する格子欠陥は、素子の性能に悪影響を与えるから、イオン注入法を用いて、半導体素子を製作する場合には、打込み後に、不純物原子を置換位置に入れ、かつ、格子欠陥を消滅させるための熱処理が必要となる。

このように、イオン注入法を半導体素子の製作に応用するためには、まず、電気的性質などの物理現象を明らかにすることが必要であるが、その他にも、素子の性能，信頼性、価格，および生産性など、実用面をも含めた広い範囲の問題を解決する必要がある。

現在のところ、イオン注入に関する物理現象の解明は、Si基板に対しては、ほぼ終ったといって良く、熱拡散法では実現できなかった、不純物分布を必要とする素子、および、熱拡散法では性能のばらつきが大きく，歩止まりの悪い素子の製作技術として実用化されている。しかしながら、まだ、総ての分野で、熱拡散法に置き換わる工業技術とはなっておらず、打込み装置の改良などによる。低価格、大量生産システムの開発が期待されている。

本節では、イオン注入法を、半導体素子製作技術としてみた場合に、有用となる打込み条件、および、その条件を達成するための打込み装置について述べる。

---

* Si中にBイオンを打込んだ場合，打込んだままの状態で置換位置を占めるBイオンの割合は，約30%である。(7)

1.3.1 打込み条件

イオン注入法において，不純物分布を決定するパラメターを以下に示す。

(A) 打込み条件

① 打込みイオンの種類
② 基板の種類
③ 打込みエネルギー
④ 打込み量
⑤ 打込み速度
⑥ 基板温度
⑦ 打込み角度
⑧ 真空度

(B) 熱処理条件

① アニール温度
② アニール時間
③ 雰囲気

本項では，(A)の打込み条件についてだけ考察を行ない，(B)については2.4で述べる。

(A)の打込み条件のうち不純物分布と、最も密接に関係があるのは①～④の条件である。これらの条件により、不純物分布がどのように変化するかを明らかにするため、Si中に100keVで打込まれたイオンの分布を図1-2に示す。

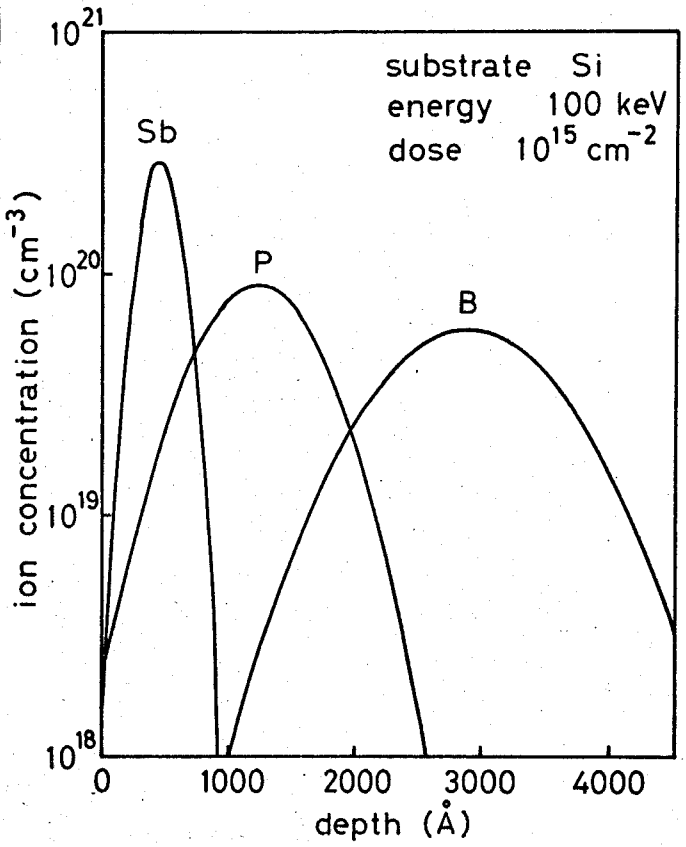


図1-2
Si基板中のB, P, およびSbイオン分布。
(エネルギー 100 keV, 打込量 10^{15} 個/cm^2)

イオン分布の導出法に関しては、章2以後で述べるが、イオン注入法により導入された不純物の分布は、同図に示すようにガウス分布で近似でき、最大濃度を示す位置は、基板表面から、ある程度奥に入った位置となる。

まず、①の打込みイオンの種類については、図1-2に示すように、同じ打込みエネルギーならば、重いイオンほど最大イオン濃度を与える位置、したがってPN接合の位置が浅くなる。

同様なことは、②の基板の種類についてもいえるが、基板の場合には、さらに原子密度が関係してくるため、基板原子の質量よりも、比重がオーダの目安となる。

つぎに、③の打込みエネルギーEは、最大イオン濃度を与える位置に直接関係し、最大イオン濃度を与える位置は、E^m ($m = 0.5 \sim 1$) に比例して増加する。

*導出法については、2.2参照。

ただし、打込みエネルギーを大きくすると イオン分布の分散が同時に増加し、同じ打込み量の場合には、エネルギーが増加するにしたがって、最大イオン濃度が減少する。

また、④の打込み量に関しては、イオン濃度が、基板原子密度と同程度にならない限り* 打込み量の増加によって、イオン濃度は線形に増加すると考えられる。

ただし、活性化されるイオン数が線形に増加するとは限らず、最大イオン濃度が不純物の固溶度よりもかなり低いにもかかわらず、活性化されるイオン数が少ない例[8][9]あるいは、逆に、固溶度以上のキャリア濃度が観測されている例もある。[10] Si基板の場合、打込みイオンが、ほぼ100%活性化されるのは、B, P および Sb イオンを打込んだ場合であり、半導体素子を製作する場合、通常これらの不純物が用いられる。[8],[11],[12]

つぎに、⑤～⑧の条件について考える。打込み速度が、不純物分布に、大きな影響を与えるのは、打込み速度が大きくなり基板温度が上昇する場合である。一例として、トランジスタのエミッタ領域を製作するために、100 keV, 3×10^{16} 個/cm^2 のイオン注入を10秒で行なう場合を考えると、通常のウェハーの設置状態では基板温度は、300°C以上になることが、横凝実験より確かめられており、[13] このような場合には、⑥で述べるホットインプランテーション状態になり、不純物分布が図1-2に示す分布から、ずれてくる。[14]

つぎに、⑤とも関連する基板温度の問題を考える。基板温度を上げて行なう打込みは、ホットインプランテーションと呼ばれており、(1)格子欠陥の発生が少ない。[15],[16] (2)不純物が増速拡散**により奥く深くまで入る。[16],[17] などの利点を持つが、反面、(3)濃度分布の急激な変化が得られ

---

* 同程度になった場合には、打込みイオンどうしの、衝突確率が無視できなくなり、イオンの分布は、変化すると考えられる。

** 2.4 参照。

ない。* (4)発生した格子欠陥を回復させるには、室温打込みの場合よりも高い温度の熱処理が必要である。(12) という欠点もあり、現在のところ主要な技術とはなっていない。

逆に、基板温度を室素温度まで下げて行なうコールドインプランテーションは、打込み直後の格子欠陥数は多いが、(18)(19) 室温打込みの場合よりも低い温度で、キャリアが活性化されるという特長を持つ。(12),(20)

(7)の打込み角度が、不純物分布に与える不確定要素として問題となるのは、単結晶の低指数の軸とイオンビームの方向が一致した場合である。この場合には、イオンが結晶中に深く入るが、** この現象の角度依存性が強いために、イオンビームが平行でない場合には、不純物分布がウェハー内の場所によってばらつき、素子製作上問題となる。

最後に、(8)の真空度に関しては、真空度が悪い場合には、走行中に電子を捕えて中性原子となる確率が増え、打込み量の正確な値が得られなくなること、および、試料表面が汚れることなどの問題がある。

以上の議論は、1回の打込みを行なうとして、打込み条件と、不純物分布との関係を求めた。より一般的な形状の不純物分布を得るためには、イオンの種類、および、エネルギーを変えて、2重、3重に打込みを行えば良く、理論的検討、(21) および、素子の製作例 (22)~(26) がいくつか報告されている。

---

* (2)(3)は増速拡散によって生ずる表裏の現象である。

** この現象はチャンネリング効果と呼ばれている。詳細は2、3で述べる。

1.3.2 打込み装置

本項では、通常用いられる打込み装置について述べ、工業的に用いられている エネルギーおよび、電流量の範囲を示す。打込み装置の概略を図1-3に、また、装置の外観を図1-4に示す。

イオン源

イオン源に要求される特性は、

(1) 安定に動作し、長寿命であること。

(2) 大出力、高密度ビームが得られること。

(3) エネルギー巾が小さいこと。

(4) 金属を含めた広範囲の物質がイオン化できること。

(5) 消費電力が小さいこと、

(6) 目的によっては、多価イオンを含む割合が大きいこと。

などである。[27]

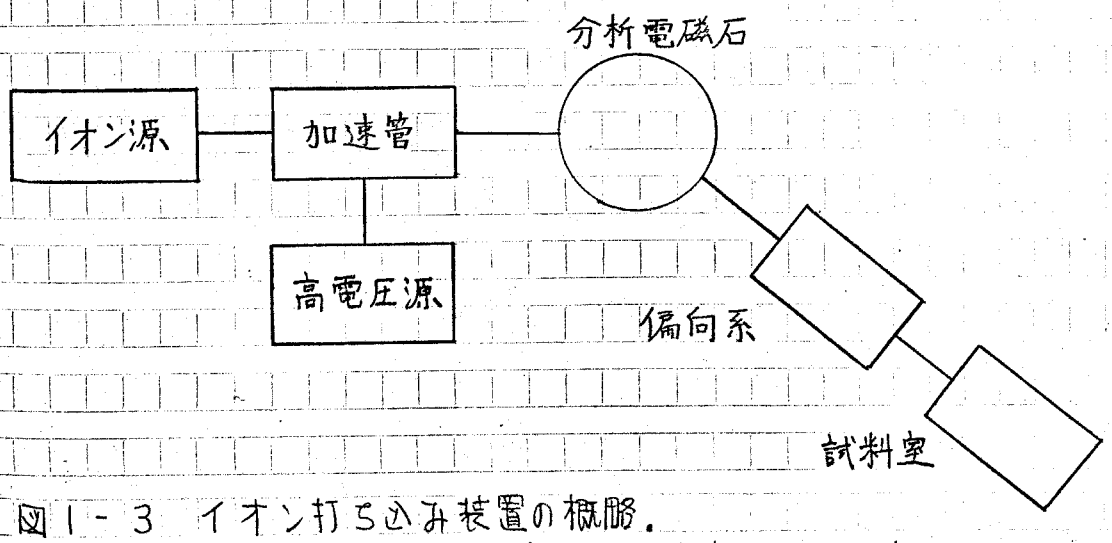
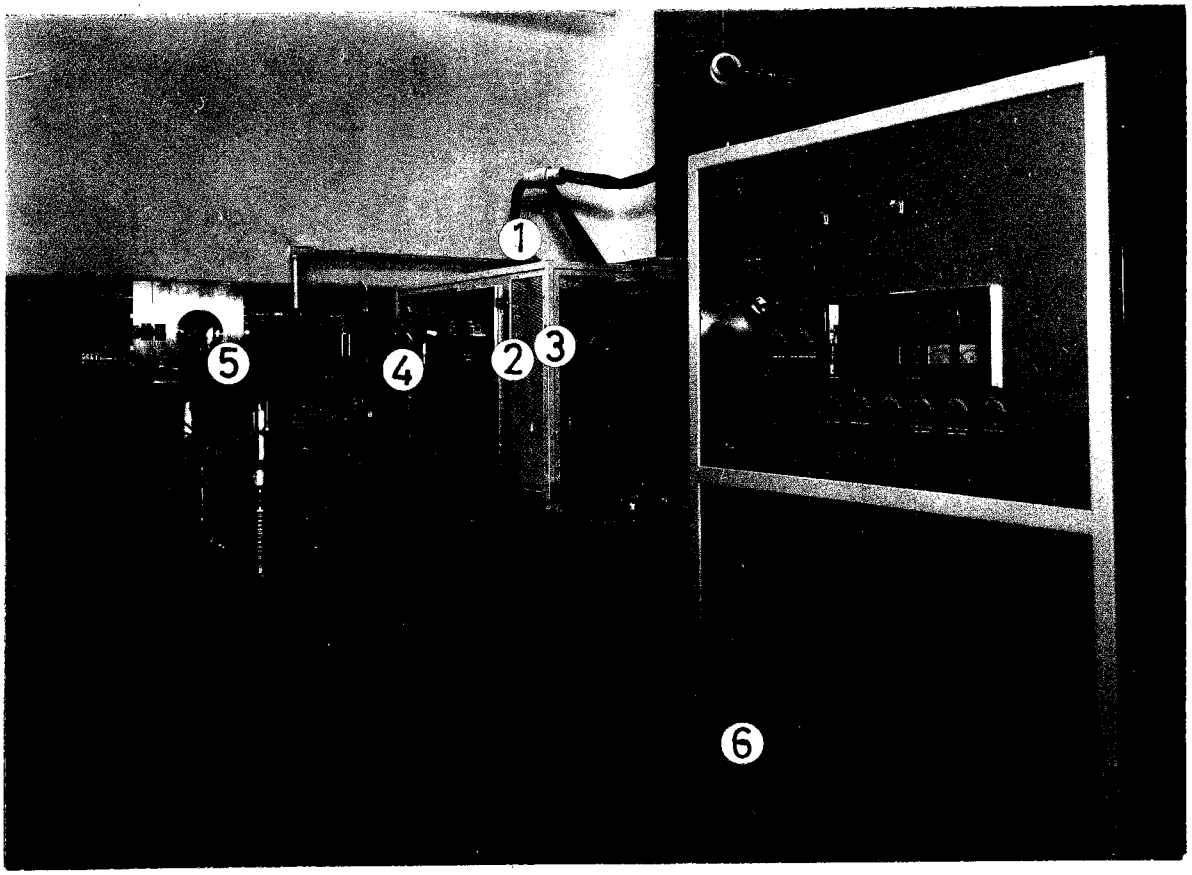


図1-3 イオン打ち込み装置の概略。



① 高電圧部　② 加速管　③ 分析電磁石（高圧部内）
④ 偏向系　⑤ 試料室　⑥ 高圧電源
最高加速電圧：50kV

図1－4　イオン打込み装置の外観（写真は，日立中央研究所の御好意による．）

(3)のエネルギー巾が大きい場合には、分析電磁石を通した後も、目的としているイオンだけを分離できない可能性がある。また(6)の多価イオンを含む割合が大きい場合には、同じ加速電圧で、2倍、3倍のエネルギーを持ったイオンを比較的短時間で打込むことができる。

現在用いられているイオン源としては、目的とする原子が気体、あるいは、気体化合物の形で存在する場合には、高周波放電形が、また、金属原子など固体の形で存在する場合には、電子衝撃形が多く用いられている。通常のイオン電流は数μA～数十mAであるが、大量生産用として、1mA以上のイオン電流が得られるものがある。[28] なお、1mAのイオン電流を10cm×10cmの面積に打込むと仮定すると、10^{19} cm^{-3} 程度の不純物濃度を要求されるトランジスタのベース領域を、約1分間で製作することができる。

加速器

最大電圧が数十kV以下の場合には、トランス形の電源を用いることもできるが、電圧が100kV～300kVの場合には、通常コック・クロフト・ワルトン形の加速器が用いられる。加速電圧が300kVを越えると、高電圧を大気で絶縁することが困難になり、装置が大形化する。また、500kV～3MVの加速器としては、バンデグラフ形が用いられる。

工業用として通常用いられる装置は、最大電圧300kV以下のもので、2価のイオンを用いると、最大エネルギー600keV程度までのイオン注入が行なえる。

分析電磁石

イオン源から引き出されるイオンには、目的とするものの他に、電荷量の異なるもの、分子イオンなどが含まれているため、質量分析をして、目的のエネルギーを持つイオンだけを試料室へ導く必要がある。
磁界による分析では、q/M_1 の等しい $^{14}N^+$ と $^{29}Si^{++}$, $^{14}N_2^+$ と $^{28}Si^+$ などは分離することができない。
エネルギーの高いイオンを曲げるためには、高い磁束密度が必要であるから、一部の加速を、前段で行ない、分析器を通した後に後段加速で、所定のエネルギーにする方法もある。ただし、この場合には、分析器を高電位にする必要がある。

偏向系

半導体素子のばらつきを少なくするためには、均一にイオン注入することが必要であり、通常、静電偏向系で、ビームを2次元的に走査しながら打込みを行なう。ただし、イオンビーム強度が 200～300μA 以上になると、ビームがプラズマ状になり、電気的掃引ができなくなる。このような場合には、試料を機械的に掃引する必要がある。[28] 電気的掃引を行なった場合に得られる試料面上の打込み量の均一性は、適当な条件を選ぶことにより、±3％以内となる。[29]

試料室

前項で述べた問題点を避けるため、試料室の真空度は通常 5×10^{-6} mmHg 以下に保つ。工業的には、1回の真空引きにより、20枚程度のウェハーに打込む装置が開発されている。

1.4 イオン注入法の素子製作への応用例

本節では、イオン注入法を用いて製作された素子が、イオン注入法のどのような特長を生かしたものであるのかを示し、個々の素子への応用例について述べる。

イオン注入法を用いて製作された素子の分類を図1-5に示す。同図より、現在イオン注入法を用いた素子が製作されているのは、主にSi基板についてであり、しかも、拡散法では実現困難な濃度分布や均一度を要求される素子であることがわかる。

現在、拡散層やエピタキシャル層の代用として、十分実用化していないのは、主に、価格の問題である。したがって，将来大量生産に適した装置が開発されれば，この分野での発展は十分考えられ，接合位置が数μm以上に深いことが要求される素子以外は、総てイオン注入法に置き換えられる可能性がある。また、そのように深い接合が必要な場合でも、均一度を増すために、イオン注入法でプレデイポジション[大]をした後に拡散を行なうことにより、素子の均一化を図ることが可能である。

つぎに、化合物半導体への応用や、格子欠陥の利用に関しては、現在、物理的に解明されていない問題も多く、今後の研究により、物理現象が解明されたものから、素子が実用化していくものと考えられる。さらに、半導体以外の物質へイオン注入する試みは、この1～2年の間に始まったばかりであるが、いくつかの興味ある現象が見い出されている。

本節では、Si基板、化合物半導体基板、および半導体以外の物質への応用例と、格子欠陥を利用した素子の製作例について、述べる。

大 半導体表面に拡散する不純物を塗りつけること。

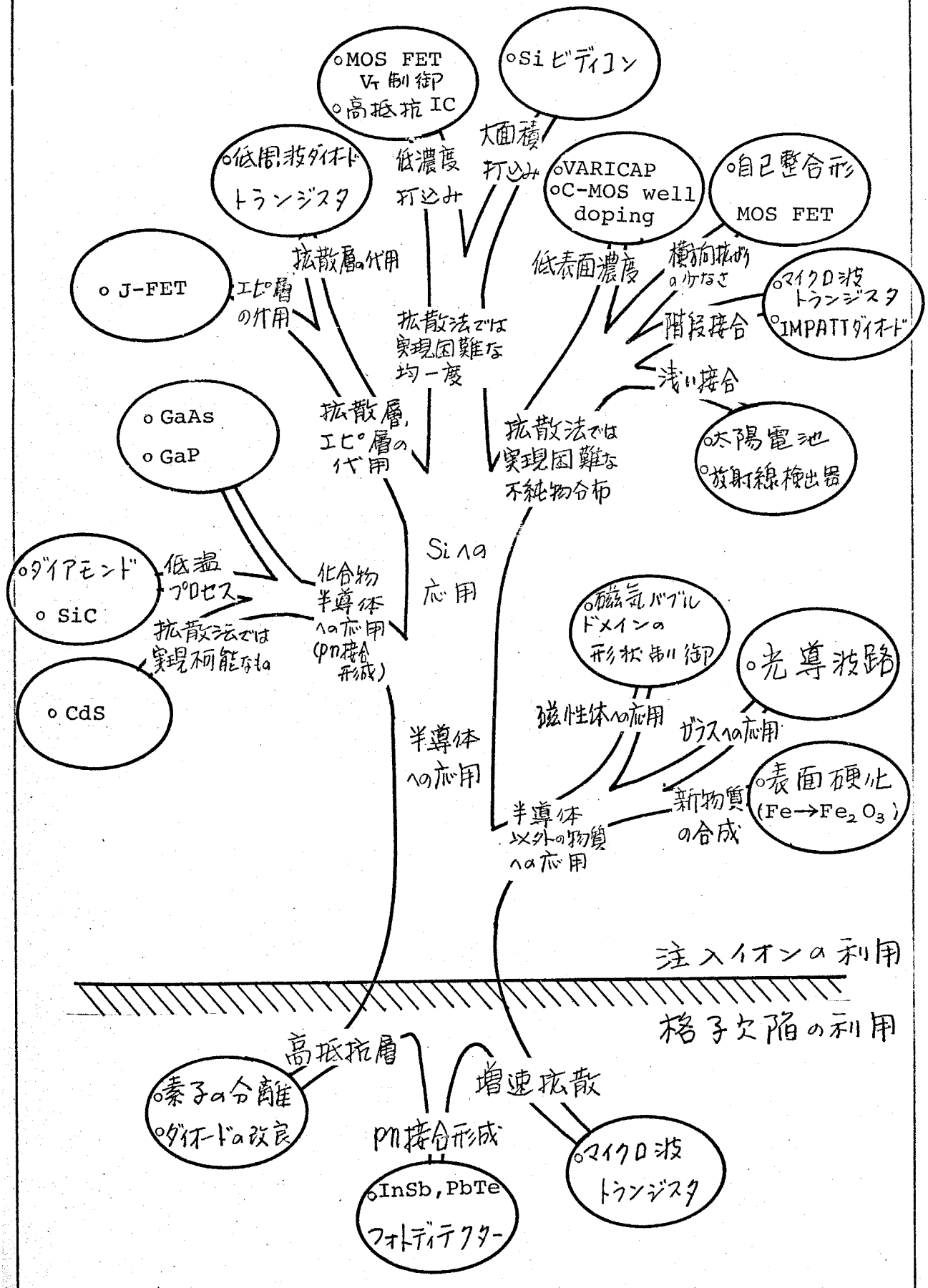


図 1-5 イオン注入法により製作された素子の分類

1.4.1. Si 基板への応用例

図1-5 に示すように、Si 基板への応用は最も多方面にわたっている。代表的素子を製作する場合の打込みエネルギーと、打込み量を図1-6に示す。同図は、打込みイオンとしてBイオンを用いた場合である。

イオン注入法は、まず、拡散法では制御が難しい不純物分布を必要とする個別素子に適用されて成功をおさめ、現在は、集積回路への応用も盛んになっている。以下，個別素子および集積回路への応用例について述べる。

(a) 個別素子

(a-1) 自己整合形MOSFET

個別素子としてのMOSFETへの応用は、現在、2つの分野で実用化されている。1つは、注入イオンの横方向拡がりが少ないことを利用して、

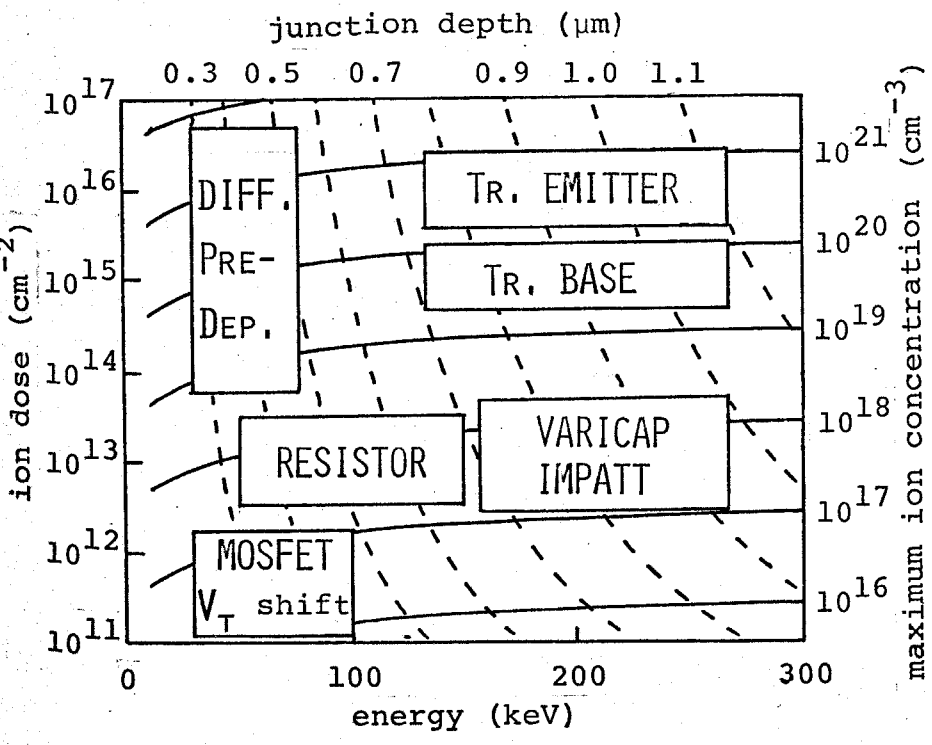


図1-6
代表的なSi素子を製作するための打込み条件[30]
(接合位置および最大イオン濃度は，10^{15} cm^{-3} の基板に，Bイオンを打込んだ場合について示してある。)

ソース，ドレインを自己整合で形成し、MOSFETの高周波特性を改善するものである。[31],[32]

MOSFETを拡散法で製作する場合には、初めのマスクでソース、ドレインの拡散を行ない、次のマスクで、ゲート電極を蒸着する。この場合、ゲート電極は、マスク合わせの際のずれを考慮して、チャンネル領域より大きく、ソース，ドレインにそれぞれ2～6μm重なるように製作される。

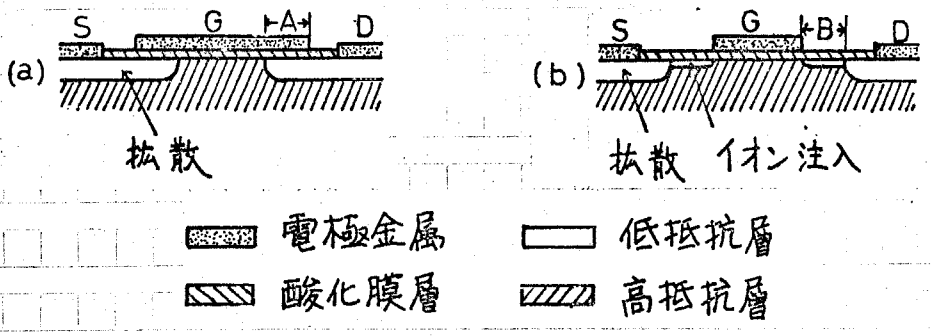


図1-7 イオン注入法による自己整合形MOSFETの製作

(図1-7(a)のA部分)。このため、ゲート、ドレイン間の漂遊容量が大きくなり、これがMOSFETの周波数上限を決定する大きな要因となっている。

これに対し、イオン注入法を用いて自己整合形のMOSFETを製作する場合には、同図(b)に示すように、ゲート電極をチャンネル領域よりも小さく作り、その後ゲートをマスクとして、パッシベーションのためのSiO_2を通して、Si中にイオン注入を行なう。この結果B部分は、それぞれ、ソースおよびドレインの一部となり、ゲート，ドレインの重なりは、イオン注入の際にゲートの裏側に回り込む不純物の量によって決定される。この回り込みの大きさは、B等どの軽いイオンを打込んだ場合でも 3000～5000 Å程度であり、[33] その結果，ゲート、ドレイン間の容量は約1/10に減少することが報告されている。[32]

a-2) MOSFETの閾値電圧制御

MOSFETへの、もう一つの重要な応用は、イオン注入法により、ゲート閾値電圧V_Tを制御しようとするものである。MOSFETの耐圧特性，ドレイン容量など、電気的特性を損なうことなく、V_Tの値だけを任意に変化させることができれば、消費電力の低下が実現するばかりでなく、集積回路として、エンハンスメント/ディプレッション形回路（E/D回路）、相補形MOSIC（C-MOS）なども容易に製作できる。

V_Tの制御は、ゲート直下の半導体表面に、不純物を少量導入することにより，他の電気的特性をほとんど損なうことなく実現できることが予想され，拡散法で不純物を導入することを想定した理論解析が行なわれている。(34) しかしながら、導入する不純物の量が10^{11}～10^{12}個/cm^2と微量であるため、拡散法では、再現性よく導入することは困難であり、イオン注入法を用いることにより、はじめて再現性の良いものが得られた。(35),(36)

この場合、V_Tのみを変化させるためには、導入された不純物は、半導体表面近くに局在することが望ましく、導入された不純物の拡散が起らないように、ゲート酸化膜形成後に、酸化膜を通してイオン注入が行なわれる。

打込みエネルギーは、

(1) 半導体表面近くに不純物が局在すること，

(2) 全打込み量が、できるだけ少ないこと，

(3) 酸化膜層の厚みに多少のばらつきがあっても、同じ量だけV_Tが変化すること

の3点を考慮して決める必要がある。

1500 ÅのSiO_2層の付いたSi基板にエネルギーを変えて打込んだBイオンの分布を図1-8に示す。* V_Tの変化ΔV_Tは，打込み量が少ない場合には，半導体中に導入された不純物の数に比例するから，(37),(38)

---

* 章5参照

図1-8の30keVの場合のように，低エネルギーで打込んで，分布の尾の部分を半導体中に導入する場合には，(1)の条件は満足するが，(2)，(3)の条件は満足しなくなる。逆に，同図の70keVの場合のように高エネルギーで打込んだ場合には，(1)の条件を満足しなくなるから，打込みエネルギーに最適値があることがわかる。最適エネルギーに関する詳細は章5で検討する。

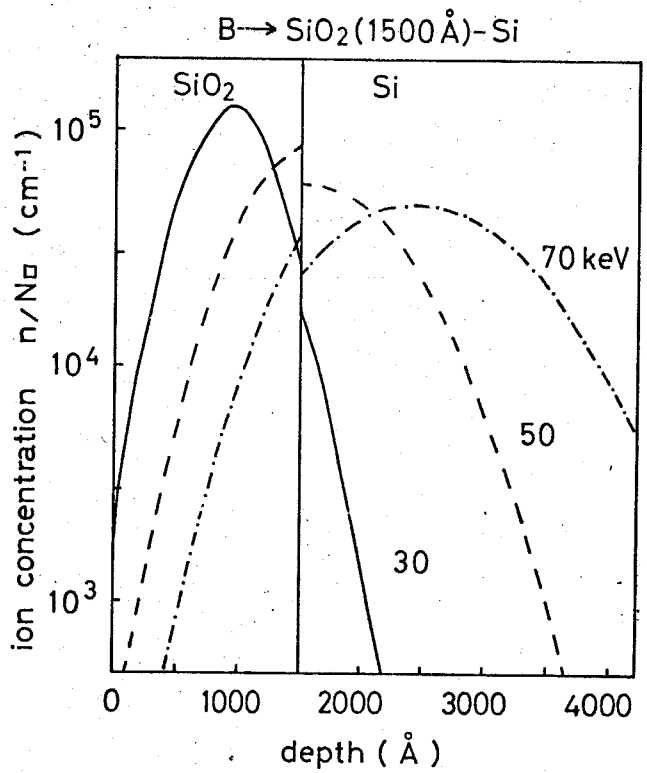


図1-8 SiO_2-Si基板中のBイオンの分布。($N_□$：単位面積当りの打込み量)

a-3) IMPATTダイオード

IMPATTダイオードへの応用は，イオン注入法の(1)処理温度が低いこと，[39]および(2)複雑な濃度分布を制御しやすいこと[40]の2つの特長を利用したものである。

複雑な不純物分布を制御しやすいという特長を生かした，代表例としては，ダブル・ドリフト形ミリ波P^+PnN^+ダイオードのP層をイオン注入法で製

作した例[25],[26],[41]があげられる。

ダブル・ドリフト形インパットダイオードは、PN接合の高電界領域で発生したホールおよび電子が、P層およびN層をそれぞれ走行して、発振に寄与するため、単位面積当りの出力は、シングル・ドリフト形の2倍になることが期待される。さらに、空乏層長が、シングル・ドリフト形の2倍になるため、ダイオード容量が1/2となり、シングル・ドリフト形と同じインピーダンスで発振させる場合には、2倍の面積のダイオードを用いることができる。その結果、単純には、総合出力としては、シングル・ドリフト形の4倍が期待でき、熱放散に関する問題が少ないミリ波領域の発振器として、注目されている。[42]

ダイオードの濃度分布を図1-9に示す。

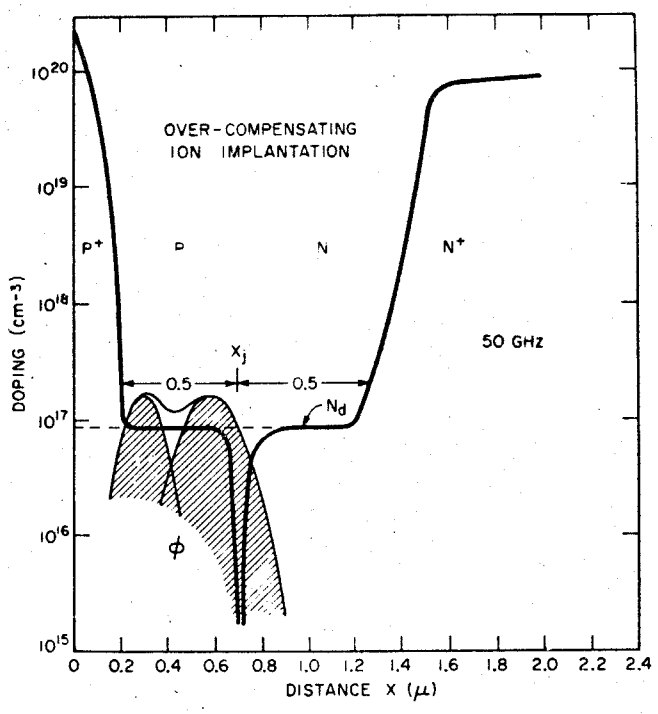


図1-9 イオン注入法により製作されたダブルドリフト形インパットダイオードの濃度分布。[25]

同図の分布は、n on n^+ 基板に80keVおよび200keVでBイオンを2重打込みしてP層を製作し、(打込み量は$4.5\times10^{12}cm^{-2}$および$7\times10^{12}cm^{-2}$)その後、875°Cで30分間Bを拡散してP^+層を形成すると同時に、打込み層のアニールを行なっている。同図に示すように、不純物分布が複雑なため、拡散法だけを用いては、製作することができなかった。同図に示すダイオードで、50GHz、出力1W、効率14%の発振が観測され、この値は、拡散法で製作された$P^+n\,n^+$形ダイオードに比べて、出力、効率とも約2倍となっている。[25]

a-4) マイクロ波トランジスタ[43),(44)]

カット・オフ周波数の高いトランジスタを製作するためには、ベース巾が薄く、(0.1μm程度)、かつ、ベース不純物濃度が10^{18}～$10^{19}cm^{-3}$程度に高いことが必要であるが、従来の拡散法を用いた場合、ベース巾を0.1μm程度にしようとすると、不純物濃度は、10^{16}～10^{17} cm^{-3}以上には高くならず、十分性能の高いものは得られなかった。

イオン注入法を用いると、このような不純物分布は比較的簡単に実現することができ、Bイオンを25～30keVで注入してベース層を形成した後、Asを拡散してエミッタを形成したマイクロ波トランジスタが製作されている。このトランジスタは、高周波における雑音指数が低く、4GHzで4dBという値が報告されている。[44)]

a-5) シリコン・ビディコン[45),(46),(47)]

シリコン・ビディコンは、Siの単結晶上に形成された10^6個程度のPN接合からなっている。均質な画像を得るためには、個々のダイオードの特性が均一でなくてはならず、逆方向のもれ電流は、一個当り10^{-14}A程度であることが必要である。

このような大面積に、均一に不純物を導入する方法として、イオン注入法が優れているが、図1-10(a)に示す方法で注入を行なうと表面の汚れや、マスクの端の効果のために、逆方向のもれ電流が大きくなり、上に示した条件を満足するようなものが得られない。

これに対して、同図(b)のように、薄いSiO_2層を付けた試料にイオン注入を行ない、アニール後に薄いSiO_2層を除去すると、(a)の構造の場合の

問題がなくなり、良好な逆方向特性をもったダイオードが得られる。さらに、(b)の場合のように、SiO_2層を通してイオン注入を行なうと、半導体の表面濃度が大きくなり、表面に伝導形の反転しない層が残る心配もない。

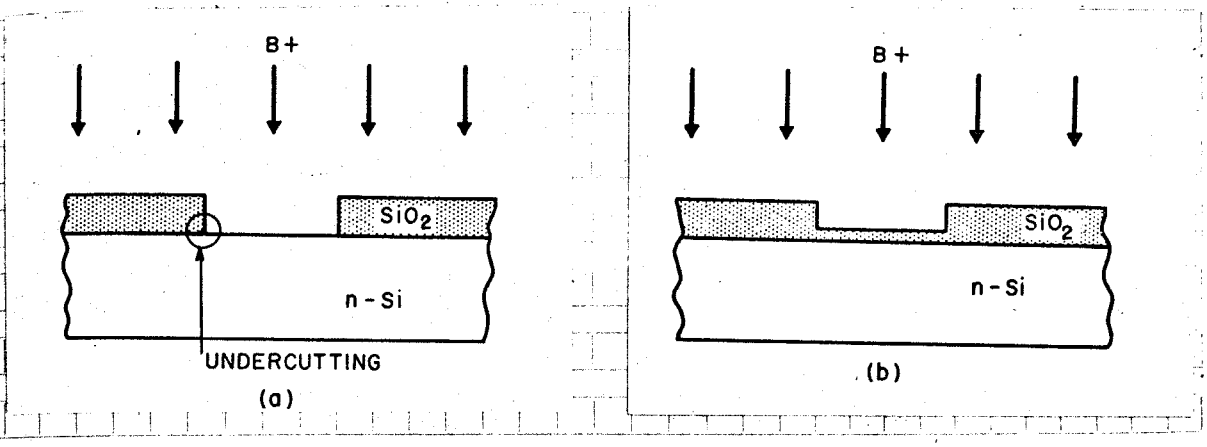


図1-10 シリコンビディコン製作のためのイオン注入。

a-6) その他の個別素子への応用

以上のほか、低濃度で均一なドーピングが行なえるという特長を生かして、超階段接合のVARICAPを、再現性良く製作した例[24]、均一な接合ができることを利用して、アバランシェフォトダイオードを製作した例[48]などが報告されている。

(b) 集積回路

b-1) FETの基板濃度制御

C-MOSのウエル・ドーピング

同一基板上に、Pチャンネルの MOSIC と、Nチャンネルの MOSIC を同時に形成する相補形 MOSIC (C-MOSIC) を製作する場合、N形の基板に対しては、P形のウエルを、まず形成する必要がある。

この時、拡散法でウエルを形成すると、表面濃度が高くなり、ウエル内にNチャンネルの MOS を製作する場合に、ソース、ドレインの形成が難しい。これに対しイオン注入法で形成する場合には、P層の表面濃度を $10^{16}\,cm^{-3}$ 程度に押えることができ、ウエルの製作法として、優れている。(49)

接合形FETの基板濃度制御

接合形FETのチャンネル領域は、低い濃度で不純物を制御よく導入する必要があり、拡散法では制御が難かしいので、従来、エピタキシャル成長法により製作されていた。しかしながら、薄いエピタキシャル層を均一の濃度に作ることは難しく、これに代わる方法としてイオン注入法により、チャンネル領域を形成しようという試みがなされている。(50), (51), (52)

また、イオン注入層を、そのままチャンネル領域として用いるのではなく、注入を、低濃度拡散のプレディポジションに用いている例もある。得られたJFETのピンチ・オフ電圧や、ドレイン電流の特性は均一となることが報告されている。(53)

このほか、ショットキー・バリア・コンタクトを用いたIGFETの直列抵抗を減らすため、自己整合でイオン注入を行なった例も報告されている。(54)

b－2) 高抵抗素子[55]～[57]

集積回路の高密度化を図るためには、小さな面積の高抵抗を製作する必要があるが、拡散法で再現性良くできる抵抗は、約1kΩ/□までのものであった。イオン注入法は、低濃度打込みを精度よく行なうことができ、かつ、伝導形の異なるイオンを二重に打込むことにより、抵抗層を基板中に埋込むことができるため、表面のろうえい抵抗もなくすことができ、100kΩ/□のものまで再現性良く作れることが報告されている。[57]

以上述べたほか、個別素子として述べたMOSFETへのイオン注入の応用は、そのまま集積回路に対しても応用されている。

1.4.2 化合物半導体および半導体以外の物質への応用例

(a) 化合物半導体への応用例

イオン注入法を用いて、化合物半導体素子を製作した例は、Pn接合ダイオードを除いては、現在のところ余り多くない。以下、代表的なものをあげる。

GaAs

現在のところ、注入イオンのドーピング効果を利用した素子の報告としては、Pn接合ダイオードの形成だけであるが,[58]~[60] この他に、注入時に発生する格子欠陥に基づく高抵抗層を利用した素子の報告がいくつかある。これについては次項で述べる。

将来における一つの可能性としては、イオン注入法を用いてGaAs-FETを製作することが考えられる。現在製作されているFETは、i-GaAs基板上に、不純物濃度 $7\times10^{16}\,cm^{-3}$, 厚み 0.3μ 程度の n-GaAs をエピタキシャル成長させ、ゲートとしてショットキーバリアを用いているものがほとんどである。この構造のFETでは、現在最大発振可能周波数 f_{max} が 30 GHz のものまで発表されているが,[61] f_{max} をさらに上げるためには、n層の濃度をさらに大きくし、その厚みを薄くする必要がある。

しかしながら、これ以上薄いエピタキシャル層を精度よく製作することは、技術的に困難であり、これに置き換わる技術として、イオン注入法が注目される。イオン注入法の場合、打込み直後のイオンの分布が、上に示した数値例に一致するような打込み条件は、簡単に実現できるが、不純物イオンを電気的に活性化するための物理現象の解明が十分でなく、また、素子の製作例は報告されていない。

CdS

CdSは熱拡散法では、P形の伝導層を形成することができない。CdSにⅠ族およびⅤ族の不純物を注入してP形層を得る試みは、いくつか行なわれており、整流特性・ルミネッセンス発光などが観測されている。(62)～(66) しかしながら、不活性ガスを注入した場合にも、全く同様の現象が表われるという報告(67)もあり、P形に反転する原因が不純物の効果によるものか、格子欠陥によるものかは、十分明らかではない。

SiC

熱拡散法でPn接合を形成するためには、2500°C程度の処理温度が必要である。イオン注入法を用いた場合には、N, P, Sb, Biの打込み後、1100°Cから1800°Cのアニールにより、n層が形成でき、Pn接合ダイオードが得られることが報告されている。(68),(69) Ⅲ族不純物を打込んだ場合には、n形を示す格子欠陥の存在のため、低抵抗のP層が得られないという報告がある。(70)

その他の化合物半導体

ZnTe(71)(72), GaP(73)～(76), InSb(77),(78), InAs(77), CdTe(78)などへのイオン注入が研究されている。また、化合物半導体ではないが、ダイアモンド,(79) Ge(80)へのイオン注入も行なわれている。

(b) 半導体以外の物質への応用例

現在試みられている応用として、ガラスへのイオン注入による光集積回路の製作,(81)(82) 磁気バブルドメインの形状制御を目的とした磁性材料へのイオン注入,(82) 鉄のさび止めを目的としたOイオンの注入(82)などがある。

1.4.3 格子欠陥を利用した素子製作

イオン注入の際に発生する格子欠陥を素子の製作に利用する方法として、現在、つぎの2つが考えられている。 その1は、格子欠陥によって生ずる高抵抗層、あるいは、伝導形の反転した層を利用して素子を製作するものであり、 その2は、熱平衡状態以上に存在する空孔によって生ずる、不純物の増速拡散*を利用して、半導体素子を製作する試みである。

格子欠陥層が高抵抗になるか、あるいは、どちらかの伝導形を示すかは、格子欠陥のエネルギーレベルが禁止帯中のどこに出来るかによって変ってくる。格子欠陥の影響だけを調べるためには、半導体にプロトン、あるいは不活性ガスをイオン注入すればよく、高抵抗層になる半導体の例としては、Si,[83] GaAs,[84] があり、CdS,[67] Ge[85] はP形の、SiC,[70] $Hg_{1-x}Cd_xTe$[86] InSb,[87] PbTe[88] はn形の伝導性を示すことが知られている。

(a) 高抵抗層の形成

a-1) ダイオードの整流特性の改善

この研究は、イオン注入の研究の最も初期に行なわれたもので、Si表面に1～30keVのH, He, Ne, Arイオンなどを注入すると、点接触ダイオードの整流特性が著しく改善されることが示された。[89] 現在でも、この方法を用いて、プレナー形ショットキーダイオードの特性改善を試みる研究が行なわれている。[90]

a-2) 高抵抗層を用いた素子の分離

GaAsにプロトンを注入した場合には、10^{13}個/cm²と、Si[83]にくらべて、

---

* 2.4参照

3桁以上低い打込み量によって $10^5\,\Omega$cm 程度の抵抗層が形成でき、[84] 打込み量が実用的なため素子の分離、あるいは、ショットキーバリア・ダイオードの端面におけるブレークダウンの抑制に応用されている。素子の分離を行なった例として、プロトン注入により、ストライプ構造の半導体CWレーザーを製作し、発振効率を向上させた例[91]および、ショットキーバリア・フォトダイオードを製作した例[92]がある。また、プロトン注入による高抵抗層を利用したsemi-insulating-gate FETを製作した例も報告されている。[93]

b) Pn接合の形成

P形の InSb,[87] $Hg_{1-x}Cd_xTe$[86] およびPbTeにプロトンを注入して、フォトディテクターを製作した例、および、レーザー発振を観測した例が報告されている。[88]

c) 増速拡散を利用した素子製作

Siのnn$^+$エピタキシャル基板に、高温でプロトンを注入した場合、注入部分のエピタキシャル層内に、基板不純物が増速拡散する現象が知られており、[1] この現象を用いて、マイクロ波トランジスタの高周波特性を改善する試みがなされている。[94],[95]

従来のマイクロ波トランジスタは、f_T（ゲイン・バンド巾周波数）を向上させるため、図1-11(a)に示すように、ベース領域を薄くすると同時に、低濃度のコレクタ領域巾を薄くし、コレクタ空乏層中の走行時間遅れが少なくなるように設計されている。しかしながら、同図(a)の構造では、コレクタ容量が大きくなり、大きな利得を得ることが難しい。そこで、f_T を大きく保ったまま、コレクタ容量を減らす方法として、同図(b)に示す構造が提案された。

すなわち、基板として、従来のものよりエピタキシャル層の厚いものを

準備し、トランジスタの活性領域に、あらかじめ、プロトンを注入して基板不純物の増速拡散を起し、活性領域の直下だけ、n層の厚みを薄くする方法である。このような構造では、f_Tは変化せずコレクタ容量だけが減少し、利得が増加することが予想される。実験的には、4GHzで1dBの電力利得の増加が報告されている。(1)

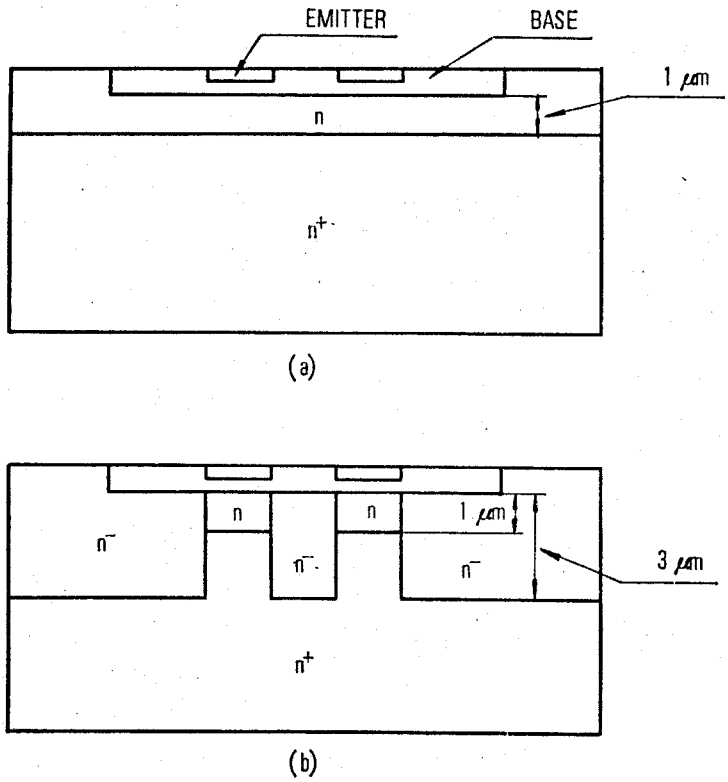


図1-11 マイクロ波トランジスタの濃度分布。

1.5 本研究の目的と意義

1.5.1. イオン注入法に関する研究の歴史的経過と本研究の意義

イオン注入法の歴史は割合古く、1950年代の初めから、点接触ダイオードの特性改善を目指した研究が始まり、Si 基板に He を打込むことにより整流特性が著しく改善されることが見い出されている。(89) また、Ge に不純物イオンを打込んだ場合に、Pn 接合が形成されることも明らかとなったが、半導体の電気特性に寄与するものが、イオン注入された不純物であるのか、あるいは、イオン注入の際に発生した格子欠陥であるのかが、はっきりせず、その後の熱拡散法の発達のために、半導体への不純物導入を目的とした研究は一時中断される形となった。

その後も、原子と固体との相互作用という興味から研究が続けられ、1963年に放射性同位元素を用いた Davies らの実験から、特定の結晶軸方向にイオンが深く浸入するチャンネリング効果が見出された。(96) また、同年、Lindhard, Scharff, Schiott によって、理論的に求められた固体中のイオンの空間分布は、Davies らの実験結果と良く一致し、この頃から、次第に、イオン注入に関する物理現象が明らかになってきた。** Lindhard らの理論は、現在でもイオン注入に関する基礎理論として用いられている。(97)

また、1967年には、Davies らが、チャンネリング効果を利用した He 後方散乱法が、イオン注入層の格子欠陥の研究、および、注入イオンが結晶中で占める格子位置の研究に有効な方法であることを示し、*(15) イオン注入層の電気的性質と、格子欠陥との関係あるいは、電気的性質と置換位置を占める不純物原子との関係などが定量的に得られるようになった。

---

* 第6章参照

** この理論は著者の頭文字をとってLSS理論と呼ばれている。

このように、物理現象が明らかになるにつれて、1967年頃から、イオン注入法を半導体への不純物導入技術として用いようとする、機運が再び高まり、イオン注入法を用いたSiのPN接合ダイオード、およびトランジスタの製作が試みられるようになった。(98) また、これと平行して、注入層の電気的性質のアニール特性などに関する基礎データの集積が始まり、イオン注入装置に関しても、従来の、原子核物理に用いられていた軽イオンの加速装置を流用したものから、質量分析および、ビーム走査のできる半導体素子製作用のものへと置き換ってきた。

そして、1968年には、新技術開発事業団が、イオン注入法を用いた半導体素子の製作を、日立、東芝両社に委託し、わが国においても、半導体素子製作技術としてのイオン注入法に関する研究が、本格化してきた。また、この年、米国において、注入イオンの横方向拡がりが少ないことを利用した、自己整合形MOSFETが製作され、従来の製作法によるものよりも優れた特性を持つ素子が、はじめて実用化された。(31)

本研究は、このような背景の下に、1969年から始められた。すなわち、本研究が始められた時点において、イオン注入法は、新しい素子製作法として有力であることが、認識されてきてはいたが、物理現象の把握が不十分な点や、理論的裏付けの乏しい点も多く、素子の製作は、半ば試行錯誤的に行なわれていた。

まず、打込みイオンの分布に関して、実験的に求まる分布の分散が、理論値よりも大きいという不一致が問題となった。しかしながら、この違いの原因が理論の不正確さにあるのか、あるいは、打込み時のチャンネリング効果や、増速拡散現象に基づくものであるのかについては、はっきりしていなかった。

また、前記の自己整合形MOSFETを製作する場合には、パッシベーション

のための酸化膜層を通してイオン注入が行なわれるが、半導体表面に酸化膜層が付いた2層構造基板中のイオンの分布は、LSS理論では計算することができず、このような基板中のイオン分布に関する理論的検討は皆無であった。

このように、イオン分布に関しても、単一層からなる基板中の平均浸入距離以外は、はっきりした理論的裏付けがなく、打込み条件を変えた場合に、PN接合の位置がどこにできるかという最も基本的な問題さえも、厳密に予測することができなかった*。

本研究は、このように物理現象の理解が不十分で、細かい素子設計を行なうことができないイオン注入法を、素子の最適設計が行なえる安定した技術にすることを目的として、イオン分布および格子欠陥分布の理論的検討から始められた。

この間、主に装置の改良により、イオン注入法は、不純物濃度のばらつきの少ない製作法として発展し、前節で述べたように、様々な素子の製作に応用されるようになった。とくに、MOSFETのゲート閾値電圧制御を目的とした応用は、半導体素子の消費電力を低下させるという社会的要請に答えるものであるから、2層構造基板中のイオン分布を明らかにして、閾値電圧制御のための最適打込み条件を求めることを目的とした本研究は、半導体工学上意義があると考えられる。

---

*PN接合位置を知るためには、イオン分布の平均値と分散を知る必要がある。

1.5.2 本研究の目的と進め方

本研究は、イオン注入法を用いて半導体素子を製作する場合に，明らかにしなくてはならないイオン分布，格子欠陥分布に関するいくつかの問題点のうち、以下に述べる問題点について、理論的，実験的検討を行ない、イオン注入法を用いて素子を製作する場合の最適打込み条件を求めることを目的としている。

本研究で取扱ったイオン分布，格子欠陥分布に関する問題点

(a) 理論的検討

(1) 単一層基板中のイオン分布の分散に関する理論値と実験値との食い違い。

(2) 多層構造基板中に打込まれたイオンの空間分布。

(3) イオン注入の際に発生する格子欠陥の空間分布、および，基板が非晶質となる限界のイオン注入量。

(b) 実験的検討

2層構造基板中に打込まれたイオンの空間分布。

イオン注入層の格子欠陥のアニール特性

以下，第2章では，イオン注入法にともなう物理現象について，現在までに得られている知見を紹介する。

第3章では，LSS理論により与えられる基礎方程式の近似解析法について，議論を行ない，従来用いられていた1階微分方程式による近似解は，イオン分布の分散を正しく与えないこと，および，十分正確な分散を求めるためには，2階微分方程式を用いれば十分であり，3階微分方程式は用いる必要がないことを，基礎方程式の厳密解が解ける簡単なポテンシャルを用い

て，明らかにする。

つぎに，イオン分布のガウス分布からのずれに関する考察を行ない，分布の平均値に関する理論と実験との食違いを説明できる場合のあることを示す。

第4章では，多層構造基板中のイオンの空間分布を求める一方法として，基板中のイオンのエネルギー分布を用いて，イオンの空間分布を求める方法について考察を行ない，解析法の妥当性を，LSS理論から求まる結果と比較して検討する。

第5章では，第4章の結果を用いて，多層構造基板中のイオンの空間分布を計算し，層の境界面でイオン濃度分布に段ができること，および，各層を構成している物質の組合わせにより，第2層中の表面濃度が，第1層の終端の濃度よりも高くなる場合と，逆に低くなる場合とがあることを示す。この結論は，この方面の研究者の間で始めて明らかにしたもので，本研究の最も重要な貢献と考えられる。

また，多層構造基板中のイオン分布に関する物理的解釈に基づいて，Si基板上に，SiO_2, Al_2O_3, Si_3N_4 などの表面層が付いた場合に，Si中のイオン分布がどのようになるかを検討する。最後に，MOSFETのゲート閾値電圧制御を目的として，シフトすべき電圧量と，表面層厚さとを与えた場合に，最適な打込みエネルギーおよび打込み量を求めるチャートを作製する。

第6章では，従来，ほとんど明らかにされていなかった，イオン注入時に発生する格子欠陥分布の形状を，注入イオンのエネルギー分布を求める方法の援用により求め，欠陥密度が最大となる位置が，不純物濃度が最大となる位置よりも約1/3だけ表面側に近い位置であることなどの結論を導く。さらに，基板が非晶質となる限界の打込み量に関する検討を行ない，この限界量が，打込みイオンによっては大きく変化するが，基板を変えてもそれほど大きく変化しないことを示す。

第7章では、Heイオンの後方散乱法を用いて、SiO_2-Si基板に打込まれた重いイオンの空間分布を実験的に求める。測定系の分解能を考慮した議論より、実験的に求まるイオン分布が、理論的予想に一致するものであることを示し、さらに、測定系の分解能の影響を小さくすることが可能な測定条件および試料の選定について考察を行なう。

第8章では、Heイオンの後方散乱法を用いて、イオン注入層に発生した格子欠陥のアニール特性を測定し、電気的性質のアニール特性との比較を行なう。そして、従来報告のなかった高温において、アニール温度を上昇させると、格子欠陥量が増加し、キャリア数が減少するという逆アニール現象の起る場合のあることを示す。

第9章では、以上の結果をまとめ、本研究の成果と今後に残された問題点について述べる。

第2章　イオン注入法にともなう物理現象

本章では、イオン注入法の物理的基礎となっている原子の衝突現象と，注入イオンの電気的性質に関する現在までの知見を紹介する。

固体と原子との相互作用に関する理論的研究は、N. Bohr によって始められ，[99] 1963年、デンマークの J. Lindhard らにより，一応の完成をみた。[97][100]

この理論は，当時得られていたいくつかの実験結果[101][102]と良く一致することが示され，イオン注入に関する基礎理論として，今日まで，広く用いられている。

本論文の解析も、その基礎をＬＳＳ理論においているので，ここでもＬＳＳ理論に沿って，原子と固体との衝突現象を考える。

2.1 核阻止能と電子阻止能

固体中を運動する荷電粒子は、固体を構成している原子との衝突という力学的な作用と、これらの原子に付随する電子との、電気的な相互作用の2つの機構によって、しだいにそのエネルギーを失ない、ついには固体中のある位置に静止することになる。この2つのエネルギー損失機構は、厳密には、互いに独立ではないが、解析の容易さから、LSS理論では、独立な機構と仮定されており、その妥当性は実験結果との対応から広く認められている。

それぞれの機構によるエネルギー損失の割合を、入射イオンのエネルギーに対して示した数値例を図2-1に示す。同図は、実験結果を最も良く説明すると考えられているポテンシャルを仮定して計算されたものであり、その導出法については、本節の各項で述べる。

同図(a)は、基板中に打込まれた軽いイオンのエネルギー損失の割合を示す一例であり、Si中におけるHeイオンのエネルギー損失の割合を示している。一方同図(b)は、重いイオンについての一例であり、Si中のSbイオンのエネルギー損失の割合を示している。

軽いイオンと電子との相互作用によるエネルギー損失の割合$(-dE/dR)_e$は、同図(a)に示すように、3つの領域に分けて考慮することができる。領域IIIは、電子の軌道速度に比べ、イオンの速度が十分速い場合であり、イオンのエネルギーの増加とともに、エネルギー損失の割合は減少する。この領域におけるエネルギー損失は、静止している電子の近くを、原子核が高速で通過するというモデルにより求めることができる。量子力学的取扱いにより求められた結果は式(2.1)で与えられ、同式はBethe-Blochの

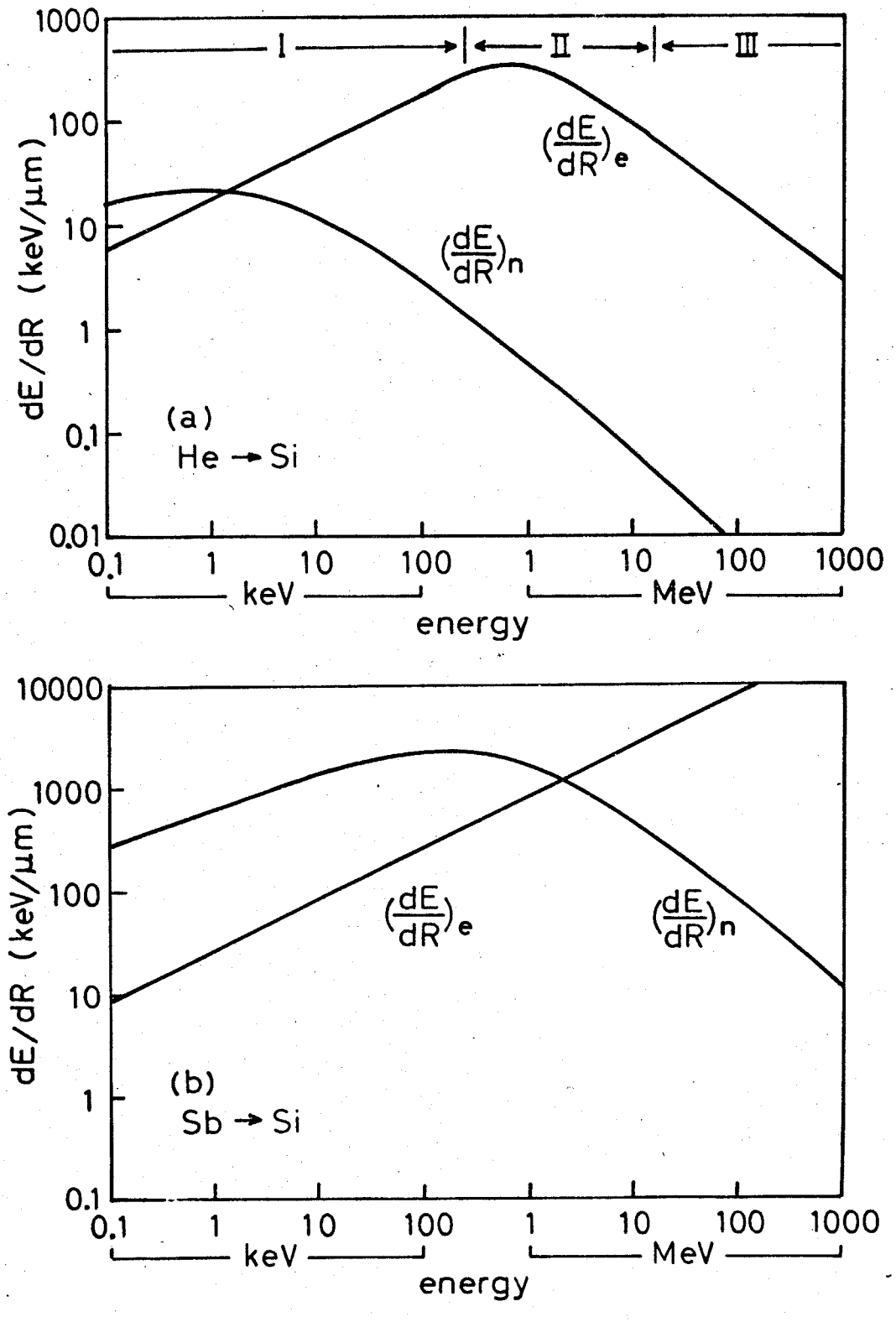


図 2-1　Si基板中における Heイオンおよび Sbイオンのエネルギー損失の割合

式として知られている。[103]

$$\left(-\frac{dE}{dR}\right)_e = \frac{Z_1^2 Z_2 q^4 N}{4\pi\varepsilon_0^2 m_0 C_0^2 \beta^2}\left\{\log\frac{2m_0 C_0^2\beta^2}{I(1-\beta^2)} - \beta^2\right\} \qquad (2.1)$$

ここで、Z_1, Z_2；イオンおよび基板原子の原子番号，q；単位電荷，N；単位体積中の基板原子数，m_0；電子の静止質量，ε_0；真空中の誘電率，$\beta = V/C$　V：イオンの速度，C_0：光速，I；物質の平均電離電圧*（$I = Z_2 \cdot I_0$，$I_0 \simeq 10\,eV$）である。

つぎに、領域Ⅱは，電子の軌道速度と、イオンの速度とが、ほぼ等しい場合であり、イオンの受けるエネルギー損失の割合は最も大きい。この領域に関しては、内殻電子の効果を考慮して、Bethe-Blochの式を補正した取扱いも報告されているが、[104][105] 重い原子に対しては、実験との一致は良くない。図 2-1 は、実験結果[106]に基づいて領域ⅠとⅢとを内挿したものである。

領域Ⅰは、イオンの速度が電子の軌道速度よりも遅い場合であり、エネルギー損失の割合は、イオンの速度（エネルギーの平方根）に比例する。イオン注入の際に用いられるエネルギー範囲は、通常この領域であり、エネルギー損失の割合についても、いくつかの検討[97][107][108]がなされているが、同図は、LSS理論がもたらすエネルギー損失の割合を示してある。

つぎに、原子核との相互作用によるエネルギー損失の割合 $(-dE/dR)_n$ を考える。同図は、イオンと基板原子核との相互作用ポテンシャルとして、実験事実を最も良く説明すると考えられている、Thomas-Fermiポテンシャルを仮定した場合の結果である。同図より、原子核どうしの衝突によるエネルギー損失が支配的になるのは、イオンのエネルギーが十分小さい場合だけであることがわかる。

一方、イオンの質量が十分重い同図（b）の場合には、イオンの速度と、

---

* 同式以外では，I は別の量を表わす。

軌道電子速度とが等しくなるエネルギーが増加し、同図に示した全エネルギー領域が、(a)の領域Ⅰに対応する。また、この場合には、通常のイオン注入に用いられる1MeV以下のエネルギーでは、核との衝突によるエネルギー損失が、支配的であることがわかる。

なお、エネルギー損失の絶対値を(a),(b)について比較すると、Sbイオンの場合には、核によるエネルギー損失が、Heイオンに比べて、100倍～1000倍大きく、同じエネルギーで打込んだ場合には、イオンはそれだけ浅い位置で止ることになる。

図2-1より、イオン注入の際に通常用いられるエネルギー範囲(数keV～数百keV)においては、

(1) 核との衝突によるエネルギー損失と、軌道電子との相互作用によるエネルギー損失とを同時に考慮しなくてはならないこと、および

(2) 軌道電子との相互作用は、イオンの速度が、軌道電子の速度に比べて、遅い場合(領域Ⅰ)のみを考慮すれば良いことがわかる。

以下、それぞれのエネルギー損失機構について定量的な検討を行なう。

2.1.1 核阻止能

ここでは、基板原子核との衝突により、イオンの失なうエネルギーの割合を、核阻止能という概念で表わす方法について述べ、核阻止能を与える式を導く。(109),(197)

イオンのエネルギー損失の割合が、各々の基板原子核との独立な相互作用によって決定されると仮定すると、エネルギー損失の割合は、単位体積中の基板原子数Nに比例するから、次式の関係が成立つ。この仮定は、非晶質基板に対しては、十分妥当な仮定であり、また、結晶基板に対しても、チャ

チャネリング効果* が起こらない場合には、良い近似を与えると考えられる。

$$(-dE/dR)_n = N S_n(E) \qquad (2.2)$$

ここで、$S_n(E)$ は核阻止能と呼ばれる。$S_n(E)$は，イオンと、基板原子核の種類によって定まる量であるから、例えば、Heイオンと C 原子との組合せについて $S_n(E)$ を求めると、式（2.2）より、ダイアモンド，および、石墨中のHeイオンのエネルギー損失を、それぞれ求めることができる。また、炭素化合物中のエネルギー損失のうち、炭素原子の寄与も同式から求めることができる。

$S_n(E)$ を与える式は以下のように求めることができる。図2-2に示すように，基板中に単位体積で厚さ δR の薄層を考え，この中に含まれる全基板原子を，同図(b)に示すように，同一平面上に並べ変え，各々の基板原子の占める面積を半径 b の円で表現すると，δR，b および，N は，次式の関係を満たす。

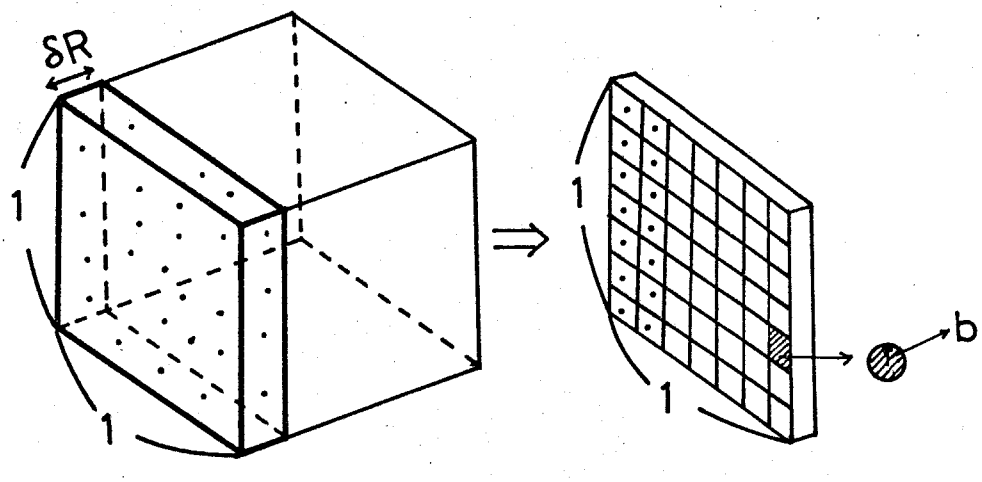


図2-2　核阻止能 $S_n(E)$ を求める概念図。

---

* 2.3.参照

$$\pi b^2 \delta R N = 1 \tag{2.3}$$

いま、この薄層に一定エネルギーEで、一様に入射したイオンが基板原子核に与える平均エネルギー$\langle T_n \rangle$を求めると、同図(b)のモデルにおいては、それぞれの基板原子は、等価であるから、$\langle T_n \rangle$は、一つの基板原子に着目して次式のように求めることができる。

$$\langle T_n \rangle = \frac{\int_0^b T_n 2\pi l dl}{\int_0^b 2\pi l dl} = \frac{\int_0^b T_n 2\pi l dl}{\pi b^2} \tag{2.4}$$

ここで、基板原子核に与えるエネルギーは、イオンの失なったエネルギー$-\delta E$に等しいから、$\langle T_n \rangle = -\delta E$と置ける。したがって、

$$-\frac{\delta E}{\delta R} = \frac{\int_0^b T_n 2\pi l dl}{\pi b^2 \delta R} = N \int_0^b T_n 2\pi l dl \tag{2.5}$$

の関係が成立ち、$\delta R \to 0$ $(b \to \infty)$とすると、

$$\left(-\frac{dE}{dR}\right)_n = \lim_{\delta R \to 0} \left(-\frac{\delta E}{\delta R}\right) = N \int_0^\infty T_n 2\pi l dl \tag{2.6}$$

となる。式(2.6)と式(2.2)を比較することにより、$S_n(E)$は次式で与えられる。

$$S_n(E) = \int_0^\infty T_n 2\pi l dl \tag{2.7}$$

すなわち、$S_n(E)$は、イオンと基板原子核との二体の衝突時における衝突径数lと、基板原子核に与えるエネルギーT_nとの関係から求められることになる。

l と T_n との関係は、二体間の相互作用ポテンシャルを仮定して、以下のように導かれる。この相互作用ポテンシャルは、両者とも荷電粒子であるから、本質的にクーロン・ポテンシャルによって与えられるが、軌道電子による遮蔽効果があるため、ポテンシャル $1/r$ には比例せず、一般に、遮蔽クーロン・ポテンシャルで表わされる。

遮蔽関数としては、理論的、実験的に、色々な関数が提案されているが[110]、代表的な関数を、相対距離 r に対して示したのが図2-3である。

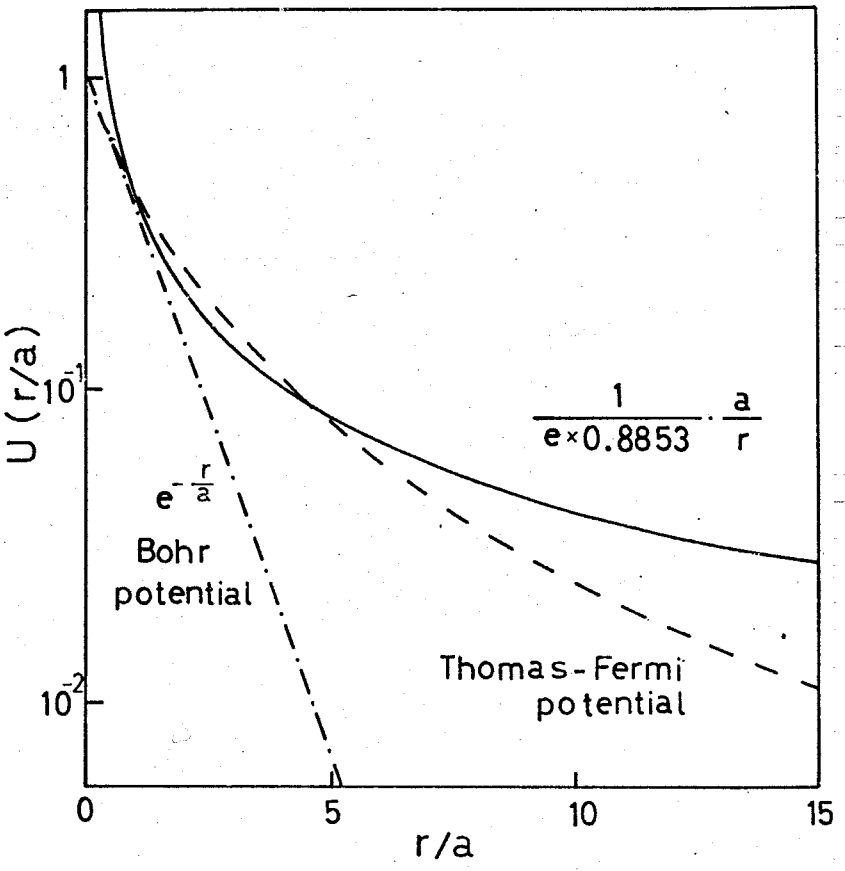


図2-3 原子間の相互作用を表わす各種の遮蔽関数。

同図にはBohrにより提案された指数関数（一点鎖線），数学的取扱いが最も簡単な $1/r$ に比例する遮蔽関数（実線），および、実験結果と最も良く一致すると考えられているThomas-Fermi関数（破線）が示されている。

これらの関数を仮定した場合の l と T_n との関係は、重心座標系を用いた解析により求めることができ、摂動近似を用いた Lindhard らの計算[109]にしたがうと、以下のように表わされる。

$$d\sigma_n = -\pi a^2 \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \qquad (2.8)$$

$$d\sigma_n = 2\pi l\, dl \qquad (2.9)$$

$$a = 0.8853\, a_0 \left(Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}}\right)^{-\frac{1}{2}} \qquad (2.10)$$

$$t^{1/2} = C_E E \sqrt{T_n / T_{n,max}} \qquad (2.11)$$

ここで、a_0：Bohr 半径，Z_1, Z_2；入射イオンおよび基板原子の原子番号、$C_E = 4\pi\varepsilon_0 a M_2 / Z_1 Z_2 q^2 (M_1 + M_2)$，$\varepsilon_0$；真空中の誘電率，$M_1$, M_2；入射イオンおよび基板原子の質量数，q；単位電荷，$T_{n,max} = \gamma E$，$\gamma = 4 M_1 M_2 / (M_1 + M_2)^2$，である。

また，f は、遮蔽関数により定まる値であり、図 2-3 に実線で示された関数（Nielsen 形遮蔽関数）に対しては、次式で与えられる定数となる。また、Thomas-Fermi 関数に対する f の値を図 2-4 に示す。同図には遮蔽関数が 1 の場合、すなわち、クローンポテンシャルに対する f の値も同時に示してある。

$$f(t^{1/2}) = \frac{\pi}{4} \cdot \frac{1}{0.8853\, e} = 0.326 = \lambda_2 \qquad (2.12)$$

ここで、$e = 2.7183$ である

式 (2.8), (2.9), (2.10) を，式 (2.7) に代入すると、$S_n(E)$ が求まる。

$$S_n(E) = \frac{C_R}{C_E} \cdot \frac{1}{\varepsilon} \int_0^{\varepsilon} f(x)\,dx = \frac{C_R}{C_E} A(\varepsilon) \qquad (2.13)$$

ここで、$C_R = \pi a^2 \gamma$, $\varepsilon = C_E E$ である。ε に対する $A(\varepsilon)$ の変化を図 2-5 に示す。

このように、エネルギーおよび核阻止能を、C_E および C_E/C_R で規格化することにより、イオンおよび基板原子のあらゆる組合せに対して、核阻止能を同一の曲線で表わせることがわかる。図 2-1 の $(-dE/dR)_n$ は、図 2-5 の Thomas-Fermi ポテンシャルに対する値を、それぞれ絶対値で表わしたものであり、平行移動することにより重ね合せることができる。

また、Nielsen 形のポテンシャルを用いた場合には、式 (2.12) に示すように、f が定数となるから、核阻止能 $S_n(E)$ は、次式のように、エネルギーに無関係となる。

$$S_n(E) = S_n^0 = \lambda_2 C_R / C_E \qquad (2.14)$$

上式は、図 2-5 に示すように、$\varepsilon \lesssim 1$ の範囲において、Thomas-Fermi 関数の良い近似となっており、また、数学的取扱いが簡単なこと、および、後に述べるように*、注入イオン分布を与える基礎方程式の厳密解が解析的に求められることなどの利点があるため、本研究においても、解析法の精度を検討する場合や、定性的傾向を議論する場合に、しばしば用いている。

結論として、イオン (Z_1, M_1) の基板 (Z_2, M_2, N) 中におけるエネルギー損失は、式 (2.2), (2.13) および、図 2-5 より与えられることが示された。

---

* 3.2 参照

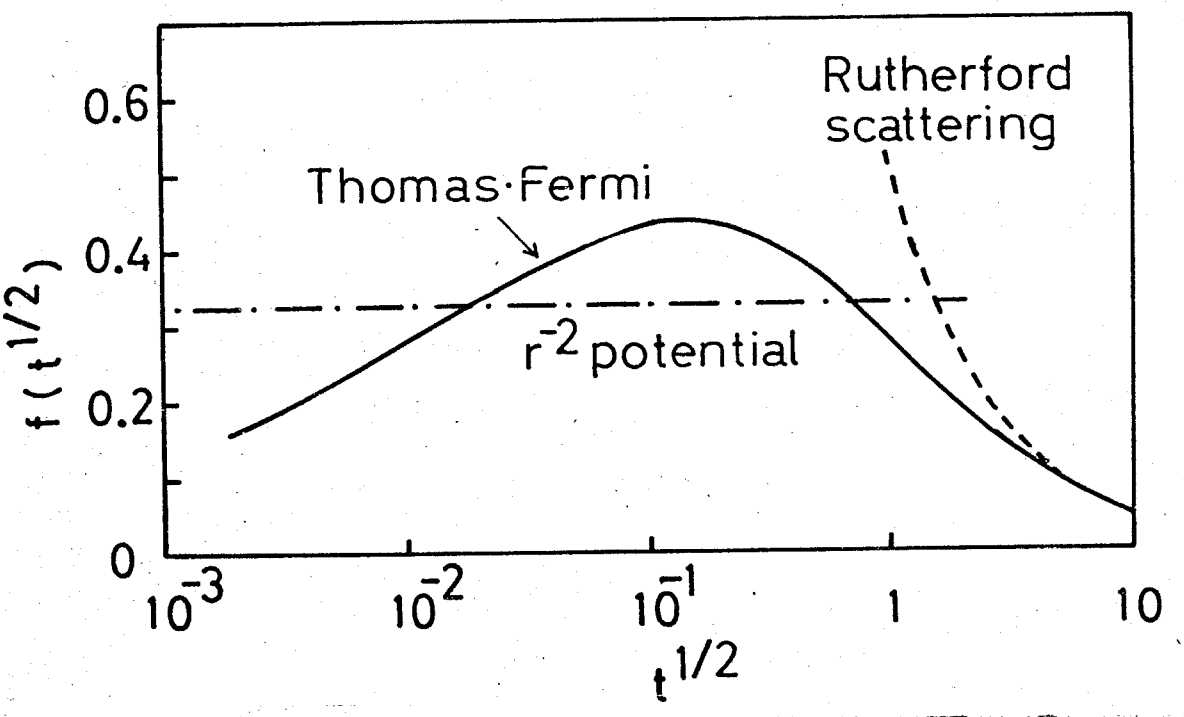


図2-4　各種遮蔽関数に対する f の値.

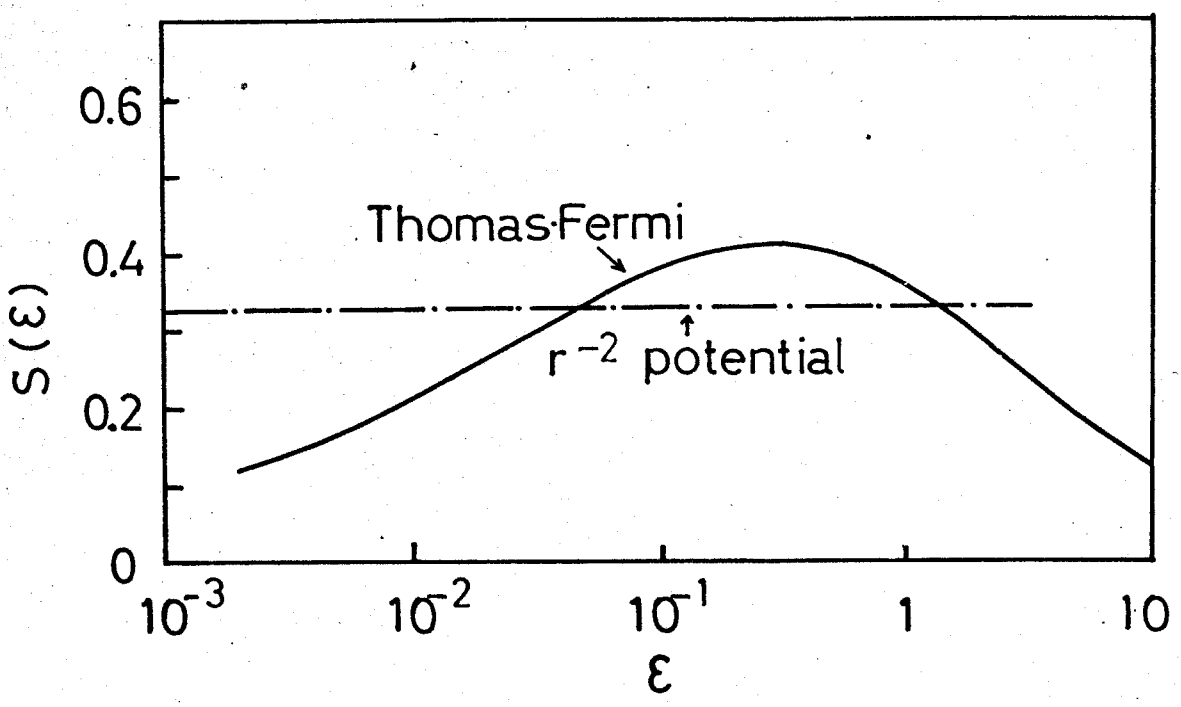


図2-5　核阻止能のエネルギー依存性.

2.1.2 電子阻止能

電子との相互作用によるエネルギー損失の割合についても、個々の原子に付随した電子との独立な相互作用を仮定し，電子阻止能$S_e(E)$を導入する。

$$(-dE/dR)_e = N S_e(E) \qquad (2.15)$$

$S_e(E)$は、図2-1(a)に示すように、エネルギーの範囲により、3つの領域に分けて考えることができるが、イオン注入法で用いられるエネルギー範囲は、通常、イオンの速度が電子の軌道速度よりも遅い領域Ⅰの範囲であるから、ここでは領域Ⅰについて、$S_e(E)$を与える式を示す。

この領域における$S_e(E)$は、入射イオンの速度に比例することが理論的に導かれており、[97],[107] LSS理論によると、$S_e(E)$は次式で与えられる。

$$S_e(E) = \xi_e \frac{2q^2}{\varepsilon_0} a_0 \frac{Z_1 Z_2}{Z} \cdot \frac{V}{v_0} \qquad (2.16)$$

$(V < v_0 Z_1^{\frac{2}{3}}$ の場合$)$

ここで，$\xi_e \approx Z_1^{\frac{1}{6}}$, $v_0 = q^2/4\pi\varepsilon_0\hbar$, $\hbar = h/2\pi$ (h：プランク定数) $Z = (Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}})^{\frac{3}{2}}$ である。同式の定数を数値計算した結果を次式に示す。

$$S_e(E) = 0.121 \times 10^{-15} \xi_e \frac{Z_1 Z_2}{Z} \sqrt{\frac{E(eV)}{M_1}} \quad (eV \cdot cm^2)$$

$$\equiv k\sqrt{E} \qquad (2.17)$$

$(E \leq 25.1 M_1 Z_1^{\frac{4}{3}}$ (keV) の場合$)$

上式は，イオンの原子番号 Z_1 の増加とともに，単調に増加する関数となり，Firsovにより，独立に導かれた $S_e(E)$ の値[107]とも，ほぼ一致しているから，本質的に妥当な結果を与えているといえる。

ただし，薄膜の透過実験から求まる $S_e(E)$ の値は，図2-6に示すように，Z_1 の増加とともに，理論値を平均値として，周期的に変動することが明らかとなった。[111]～[116]

この違いは，理論値に用いられている電荷密度が，Thomas-Fermiモデル[117]で与えられる平均的なものであるのに対し，実際のイオンの殻電子構造は，周期的に変化しているためであると考えられており，殻電子構造を考慮した考察も行なわれている。[118]～[120]

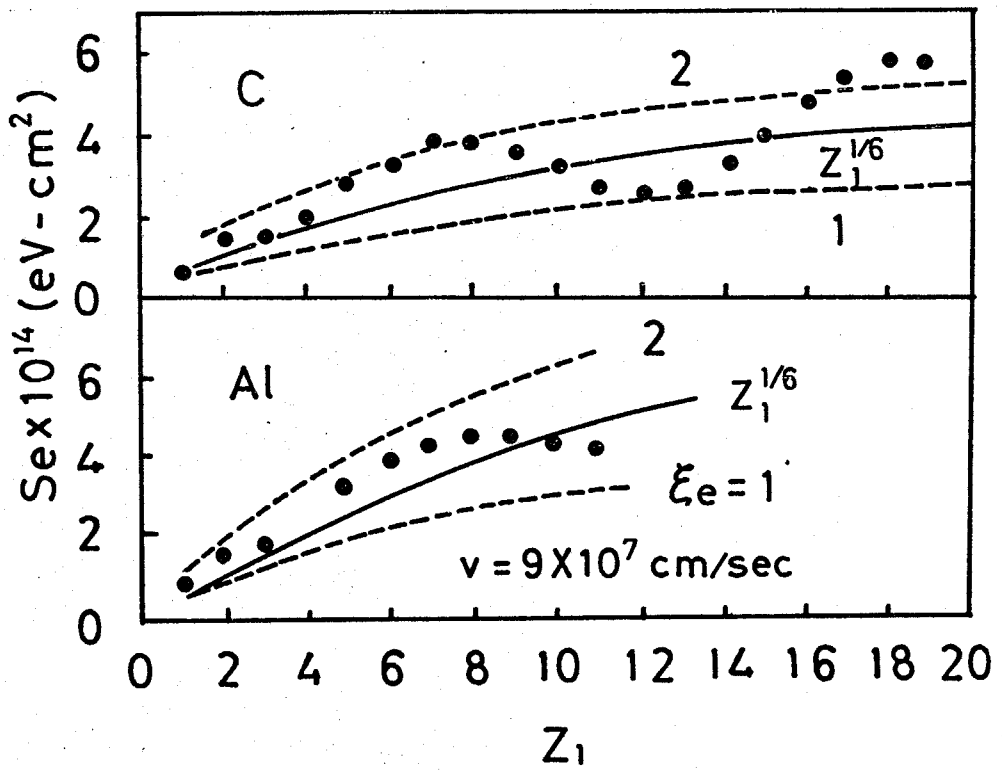


図2-6　電子阻止能の注入イオン原子番号 Z_1 への依存性。[112]

図2-6より，式 (2.16) は、平均値としては電子阻止能を、正しく与えていると言うことができるが、特定の原子番号のイオンに対しては、50%

以上の誤差が含まれると結論される。イオン注入法により、半導体中に導入されたイオンの分布は、図2-1から明らかなように、イオンの質量が軽いほど、電子阻止能の影響を強く受けるから、とくに、軽いイオンの分布を理論的に求めるためには、正確なSe(E)の値を知る必要がある。

一例として、Ⅲ族半導体の不純物として重要なB原子を、Si基板中へイオン注入した場合の分布は、実験的に求まるSe(E)の値[121](式(2.17)から求めた値よりも約60%大きい)を用いて計算すると、実験値と良く一致することが知られている。*

なお、核阻止能の大きさと、電子阻止能の大きさとが一致するエネルギーEc(臨界エネルギー)を求めることは、どちらの機構が、エネルギー損失に支配的であるかを知る上で、有用である。図2-1より明らかなように、E > Ecの場合には、電子によるエネルギー損失が支配的であり、E < Ecの場合には、核との衝突によるエネルギー損失が支配的である。

ここでは、簡単のために、核阻止能として、式(2.14)で与えられるS_n^0を用い、電子阻止能として式(2.17)を用いて、Ecを定める。

$$E_c = (S_n^0 / k)^2 \qquad (2.18)$$

入射イオンの質量とEcとの関係を図2-7に示す。同図より、Ecはイオンの質量と共に大きく変化することがわかる。

---

* 200 keVでSi基板中に注入されたBイオン分布の平均値および標準偏差に関する理論値は、式(2.17)で与えられるSeを用いると、それぞれ、7014 Å, 1386 Åとなる。一方、実験的に求まるSeを用いると、それぞれ、5050 Å, 862 Åとなり、後者の値は、図2-9に示す実験結果と良く一致している。

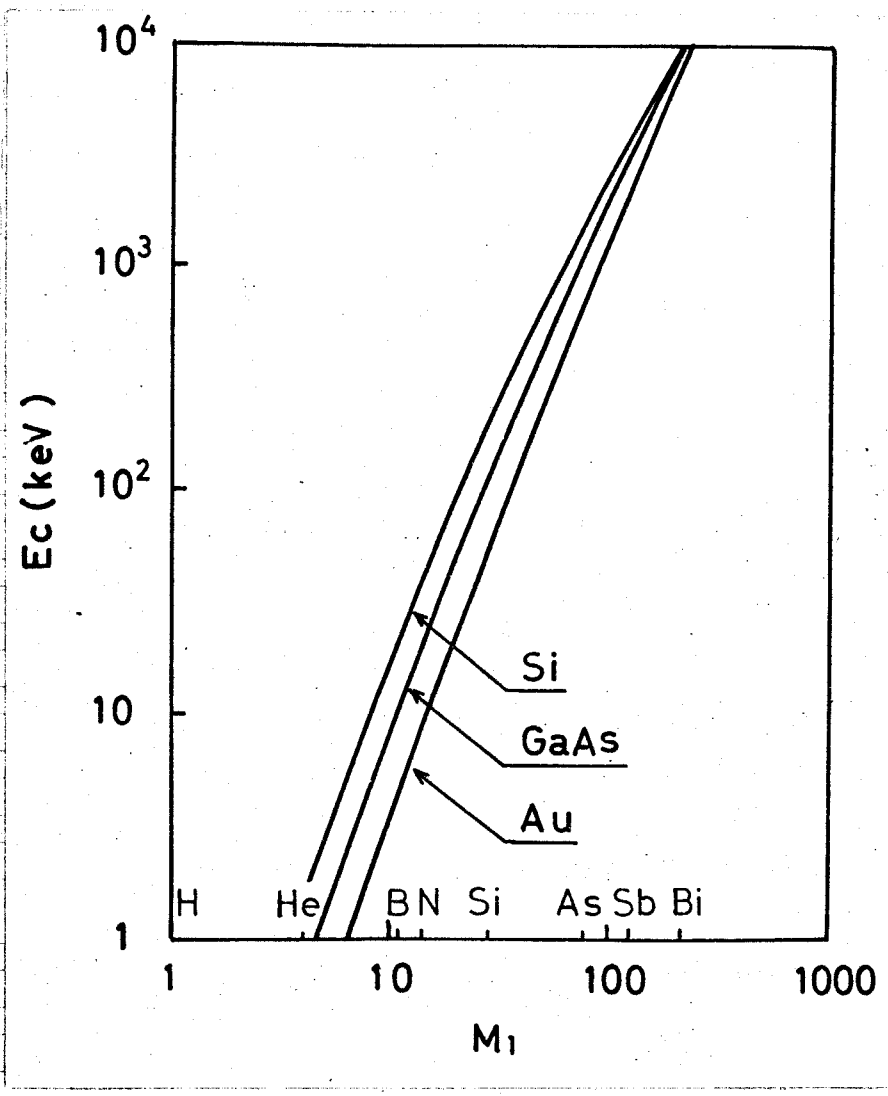


図2-7　入射イオンの質量と E_c との関係

2.2 非晶質基板中のイオンの飛程分布

本節では、ガラスのような非晶質な物質に、イオン注入を行なった場合の、イオンの空間分布について考察を行なう。

前節で議論したように、基板中のイオンは、原子核との衝突と、軌道電子との衝突という2つの機構によりエネルギーを失ない、やがて静止する。前節では、核阻止能, 電子阻止能という平均化された量を導入して議論を行なったが、個々のイオンの受けるエネルギー損失の割合は、それぞれ異なっており、したがって、イオンの静止位置にも、ばらつきが生じる。

このばらつきの主たる原因は、核との衝突過程に起因している。すなわち、核との衝突の場合には、もしイオンと基板原子との質量が等しければ、1回の衝突によって、イオンが全エネルギーを失なう確率も存在し、空間的に、どの位置を通ったかによって、イオンの失なうエネルギーは、大きく変化する。また、核との衝突の場合には、イオンの進行方向が大きく変化することも、しばしばあり、イオンの静止位置には、ばらつきが生じる。

一方、電子との個々の衝突において、電子に与えられるエネルギーは、その質量の違いから、最大でもイオンエネルギーの1%以下であり、しかも、電子は、核に較べて空間的に広く分布しているから、空間的にどの位置を通過しても、イオンの失なうエネルギーは、それほど大きなばらつきを持たない。したがって、軌道電子との相互作用について、以下の仮定を置くことは妥当と考えられる。

仮定

(1) 軌道電子との相互作用により失なうエネルギーのばらつきを、無視する。

(2) 軌道電子との相互作用によっては、イオンはその進行方向を変えない。

仮定(1)より、軌道電子との相互作用は、電子阻止能だけを用いて表現できることがわかる。一方、核との相互作用を考える場合には、核阻止能を考えただけでは不十分であり、エネルギーのばらつきを表わす量を導入する必要があることがわかる。その詳細に関しては章3で議論する。

つぎに、イオン分布を表わす量として、以下の量を慣習に従って用いる。

飛程

基板中に入射したイオンは、原子核との衝突により、その進行方向を変えながら進んでゆき、基板中のある位置で静止する。イオンの入射点から、静止点までの距離を、イオンの進む方向に沿って測った長さを、飛程Rという。また、飛程に沿って求めた静止イオンの存在確率を飛程分布という。

射影飛程

イオンの静止点の、基板表面からの深さを射影飛程R_pという。表面からの深さに対して、イオンの存在の確率を表わしたものを射影飛程分布という。実験的に求まるイオンの分布は、射影飛程分布である。また。入射点を通る軸からのずれを$R_\perp$で表わす。

これらの量を図2-8に示す。同図からも明らかなように、イオンの射影飛程は、イオンの飛程よりも短かい。

上に述べたように、注入イオンの分布として、実用上意味があるのは、射影飛程分布である。しかしながら、射影飛程分布の導出法は、章3で示すように、飛程分布の導出法に比べて複雑であるので、本項では実験結果を

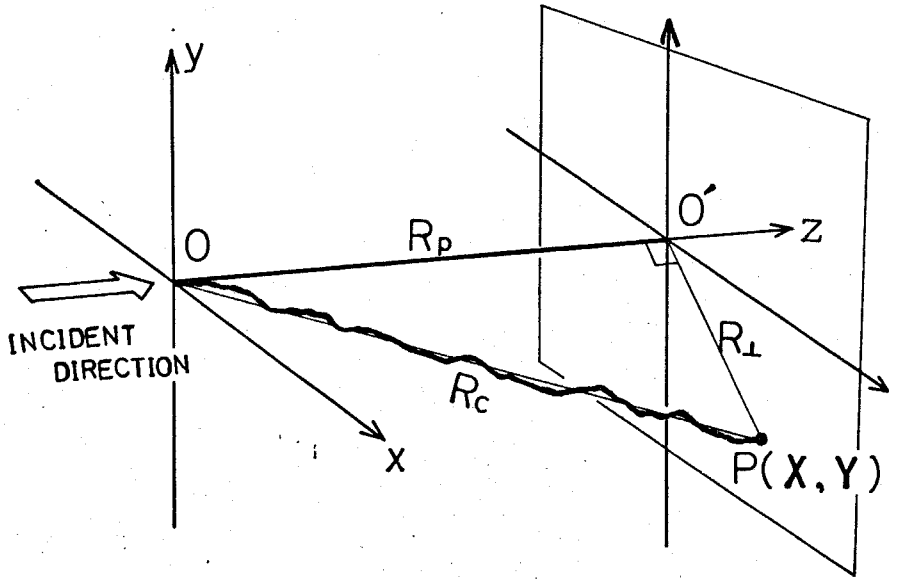


図2-8 飛程に関する諸量の定義。

示すに止め、理論的検討は取扱いが簡単な飛程分布について行なう。飛程分布を考えた場合には、実験結果との直接の対応は行なえないが、入射イオンが基板原子に較べて十分重い場合には、イオンがほぼ直進するために、実験値に対する良い近似を与えると考えられるし、また、イオン分布の物理的解釈が、射影飛程分布よりも容易であるという利点もある。

イオンの飛程分布

イオンの飛程分布の平均値（平均飛程$\langle R \rangle$）は、前節で求めたイオンのエネルギー損失の割合から直ちに求めることができる。基板中を進むイオンは、前節で求めた2つの機構によるエネルギー損失を同時に受けることになるから、エネルギー損失の割合$(-dE/dR)$は次式で与えられる。

$$-\frac{dE}{dR} = \left(-\frac{dE}{dR}\right)_n + \left(-\frac{dE}{dR}\right)_e$$

$$= N\{S_n(E) + S_e(E)\} \qquad (2.19)$$

イオンの入射エネルギーをE_0として、式(2.19)を解くと、平均飛程$\langle R\rangle$として次式が得られる。

$$\langle R\rangle = \frac{1}{N}\int_0^{E_0} \frac{dE}{S_n(E)+S_e(E)} \qquad (2.20)$$

とくに、入射イオンが重い場合には、図2-7に示すように、E_cが大きいから、通常のイオン注入法で用いられるエネルギー範囲では、$S_e \approx 0$とみなして、近似的に$\langle R\rangle$を求めることが可能である。この場合、式(2.14)で与えられる一定の核阻止能を仮定すると、$\langle R\rangle$は、次式に示すように、入射エネルギーに比例する。

$$\langle R\rangle = E_0 / N S_n^0 \qquad (2.21)$$

反対に、入射イオンが十分軽く、かつ入射エネルギーが大きい場合には、$S_n(E) \approx 0$とみなせるから、式(2.17)を用いて、次式となる。とくに、基板がSiの場合には、打込みイオンの種類に、ほぼ無関係に、式(2.23)でイオンの平均飛程が与えられる。

$$\langle R\rangle = 2\sqrt{E_0} / N k \qquad (2.22)$$

$$\langle R\rangle \approx 20\sqrt{E_0(eV)} \quad (\text{Å}) \quad (\text{Si基板の場合}) \qquad (2.23)$$

つぎに、イオンの空間分布の形状について考える。基板に打込まれたイオンは、静止するまでに、基板原子と多数回の衝突を行なう。そして、いま、基板は非晶質と仮定されているから、基板原子の並びは完全にランダムであり、したがって、イオンと基板原子との個々の衝突は、それぞれ独立な現象と考えられる。また、イオンの打込み数は通常10^{12}～10^{16}個/cm²であり、

十分大きいから、イオンの飛程分布は、良い近似で、平均飛程を中心としたガウス分布になることが予想される。

同様なことは、射影飛程分布についても言え、射影飛程分布もガウス分布で近似できることが予想される。事実、非晶質な基板に打込まれたイオンの分布は、図2-9に示すように、かなり良くガウス分布に一致することがわかる。

ただし、基板が単結晶の場合には、次節に述べる原因により、分布がガウス分布からずれる場合もあり、また、打込まれた不純物原子を電気的に活性化するために、アニール処理を行なう際に、不純物の異常拡散が起り、キャリア分布が、ガウス分布からずれることもあるが、いずれにしろ、イオン注入法で半導体中に導入された不純物は、拡散法とは異なり、基板表面から、ある深さへった位置で、最大イオン濃度を示す分布となる。

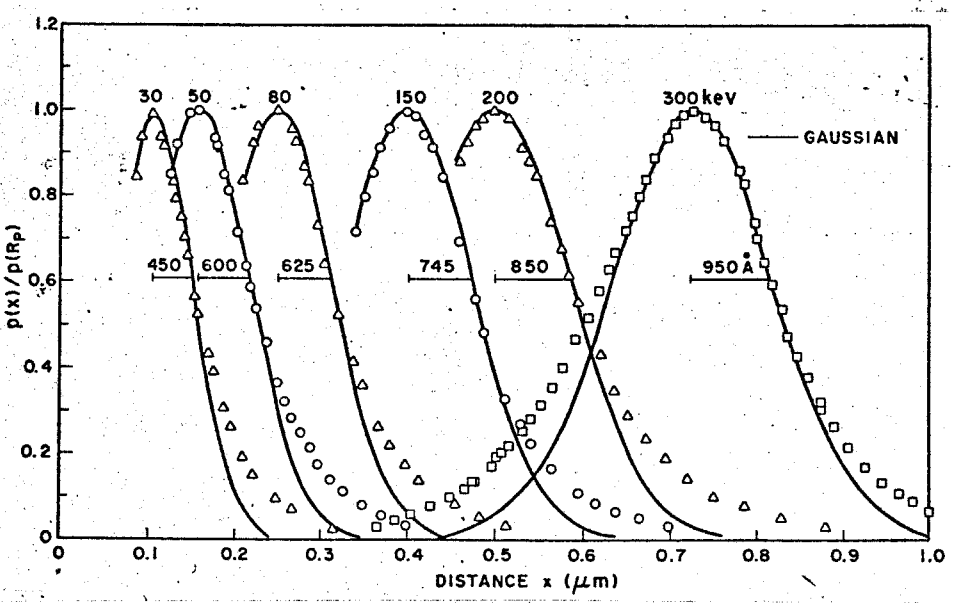


図2-9 非晶質基板中のイオン分布の一例*。(Bイオンを Si基板に注入した場合。)[122]

* 同図の実験は、単結晶基板に、非晶質とみなせる方向から打込んだものである。

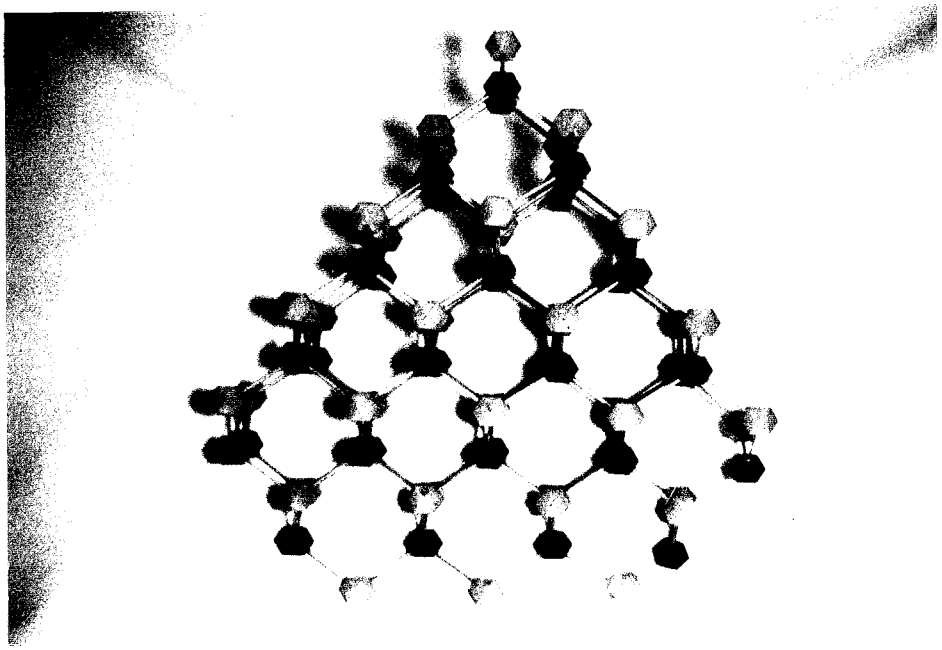
2.3 単結晶基板中のイオンの飛程分布
── チャンネリング効果 ──

本節では、単結晶基板に打込まれたイオンの分布について述べる。単結晶基板にイオンを打込んだ場合に、その分布が非晶質基板の場合と大きく異なるのは、イオンの入射方向が、単結晶の低指数の結晶軸あるいは、面と一致した場合である。

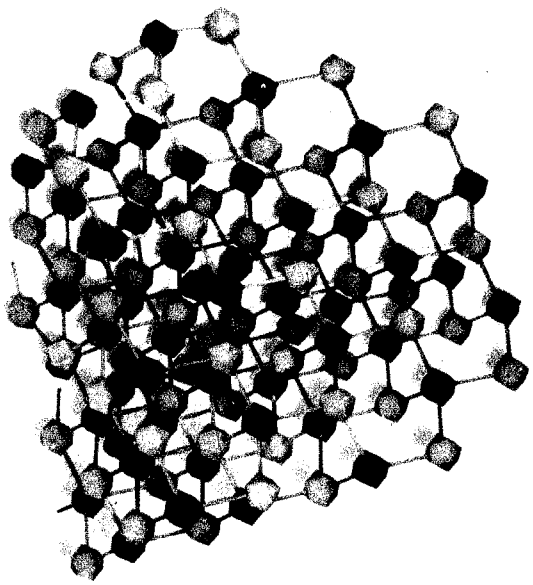
図2-10は、ダイアモンド構造の単結晶模形を、<110>軸から見た場合(a)と、低指数の結晶軸を、はずれた方向から見た場合(b)の写真である。まず、同図(b)の場合には、原子配列が規則的であることの影響は顕著ではなく、原子は空間的にランダムに存在しているように見える。したがって、このような方向から打込まれたイオンの空間分布は、基板が単結晶であっても、非晶質基板に対する理論を適用して、求めることができると考えられる。

これに対して、同図(a)のように<110>軸方向から見た場合には、同図より明らかなように、結晶中に、原子が全く存在しない空間があることがわかる。したがって、この軸に平行に入射したイオンの一部は、基板中で原子と全く衝突しないで、奥深くまで浸入することになる。このように、単結晶の軸、あるいは面に平行に入射したイオンが、結晶中で奥深く浸入する現象をチャンネリング効果という。

この現象は、実験的に求まる単結晶中のイオン分布が、ガウス分布よりも長く尾を引くこと、[96] および、薄膜を透過するイオン数が、イオンの入射方向と結晶軸とが一致した場合に、異常に大きくなること[123]から明らかになった。また、理論的には、Robinsonらのモンテ・カルロ法を用いた計算により、その存在が裏付けられ[124],[125]、Lindhard によって、解析的な取扱い



(a) <110> 軸方向



(b) 低指数の軸からはずれた方向

図 2-10 ダイアモンド構造単結晶の模形

法が示された。(126)

この現象は、通常のイオン注入法に用いられるエネルギー範囲では、結晶軸とイオンの入射方向とのなす角が、2～3°以下の場合に起り、イオンのエネルギーが低くなるほど、また、イオンの質量が重くなるほど、この現象の起る臨界角は大きくなる。

結晶軸と入射方向のなす角を、パラメターにして実験的に求めたイオンの射影飛程分布の一例を図2-11に示す。同図で、6.5° off の場合に最大イオン濃度を与える深さは、非晶質基板を仮定して、LSS理論から求まる平均射影飛程と一致する。したがって、結晶軸とイオンの入射方向が良く一致している場合には、最大イオン濃度を与える位置が、非晶質の場合に比べて、約4倍も深くなることがわかる。また、結晶軸との角度が2°程度ずれている場合には、最大イオン濃度を与える位置は、非晶質の場合と変らないが、ガウス分布よりも、はるかになめらかに濃度が減少する分布の尾ができることがわかる。

このほか、チャンネル軸によっても、イオン分布が異なり、Si基板の場合には、<110>軸の場合に最大イオン濃度を与える位置が、最も深いことが実験的に求まっている。(128)

このチャンネリング効果は、結晶の規則正しい配列に起因している現象であるから、結晶に格子欠陥が多い場合、あるいは、表面に酸化膜層などが付いている場合には、顕著に表われなくなる。(127), (129) 一般に、イオン注入を行なう場合には、打込みイオンによる格子欠陥の発生は避けられないから、結晶軸方向から打込みを行なっても、打込み量の増加とともに、チャンネリング効果の起る割合が減り、奥深く入るイオンの量が減少する。(130)

以上述べたチャンネリング効果の特長を、半導体素子製作上の立場から、利点および欠点に分類した結果を表2-1に示す。同表に述べたイオンが奥深く浸入するという利点を、積極的に利用して、IMPATTダイオードを

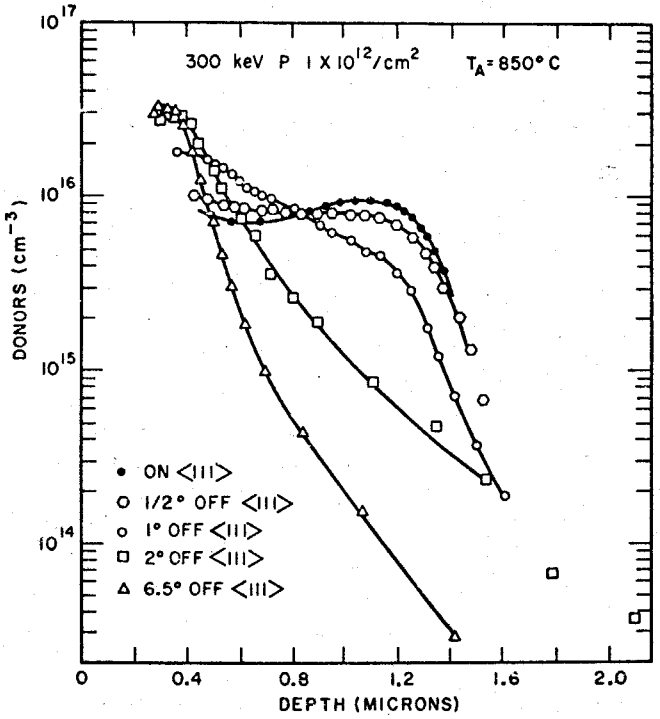


図2-11 チャンネリング効果によるSi基板中Pイオンの分布の変化。(127)

製作した例(26)も報告されているが、一般には、同表に示すように、素子のばらつきを大きくし、また再現性を悪くする原因となるため、チャンネリング効果は大量生産を行なう場合には、むしろ有害な要素となる。このため、不純物イオンを打込む前に、電気的に不活性なイオンを打込んで、あらかじめ格子欠陥を作っておき、チャンネリング効果が起るのを防いで、不純物分布のばらつきを少なくしようとする試みも行なわれている。(131)

なお、近年、軽いイオンのチャンネリング効果を、物性、および核物理の研究手段として利用する方法が急速に普及した。この方法を用いると、格子欠陥分布の測定(15),(132)不純物原子の格子位置決定、(133)核反応時間の測定、(134),(135)などが容易に行なえ、イオン注入法の研究手段としても不可欠なものとなった。本論文においても、この方法を用いて、イオン注入の際に発生する格子欠陥のアニール特性を測定している。測定手段としての詳細は、章7、および章8で述べる。

利点	1．低エネルギーで，深い位置までイオンが打込める。 2．ビームと，結晶軸とが良く一致している場合には，最大不純物濃度を示す位置よりも深いところで，不純物濃度が，非晶質基板の場合よりも，急激に減少し，より階段接合に近い分布が得られる。
欠点	1．結晶軸の僅かなずれにより，イオン分布が大きく異なる。（素子特性のばらつきが大きくなる。軸合せが困難で，大量生産に向かない。） 2．表面の僅かな酸化膜層により，イオン分布が大きく異なる。（素子特性のばらつきが大きくなる。） 3．打込みイオンの作る格子欠陥により，打込み量とともに，イオン分布の形状が変化する。（イオン分布の理論的予測が困難である。）

表 2-1　半導体素子製作の観点から考えたチャンネリング効果の得失

2.4 アニール処理

本節では、イオン注入法で導入された不純物原子を電気的に活性化するための、アニール条件について述べる。この条件には、1.3.1. で述べたように、アニール温度、アニール時間、雰囲気の3つの要素が考えられるがキャリア分布を決定する最も大きな要素は、アニール温度である。

したがって、本節では、アニール温度と電気的性質の関係と、アニールの際に起るイオンの増速拡散現象について主に述べる。

電気的性質のアニール特性

ここでは、電気的性質として、キャリア濃度、易動度、少数キャリアの拡散長を考え、それぞれのアニール特性を、Si基板中に打込まれたBおよびPイオンについて述べる。なお、化合物半導体中に打込まれたイオンのアニール特性に関しては、まだ、大部分が物理的に明らかにされていない。

(a) キャリア濃度

Si基板中に100keVで1×10^{15}個/cm^{2}打込まれたB, およびPイオンの等時アニール特性を、図2-12に示す。[20),(136)] 同図より、Pイオンは、600℃のアニールにより、100%近くのキャリアが活性化されるのに対し、Bイオンは、600℃のアニールにより、逆にキャリア数が減少し、ほぼ100%のキャリアが回復するためには、900℃のアニール温度を必要とすることがわかる。

600℃のアニールにおいて、キャリア数が減少する現象は、逆アニール

現象と呼ばれており、この温度において、置換位置を占めるBイオンが減少することが、チャンネリング効果を用いた測定から明らかになっている。(7),(137),(138)

このように、同じ条件の打込みの場合でも、打込みイオンの種類によって、キャリア数のアニール特性は大きく異なる。この違いは、打込み時に発生する格子欠陥量の違いによって起り、Bイオンを同一条件で打込んだ場合にも、基板温度を室素温度まで下げて、欠陥量を増やすか、あるいは、Bとは別に、Si中で電気的に不活性なイオンを打込んで欠陥量を増やすと、600°Cアニールにおいて、キャリア数がほぼ100%回復することが、実験的に確かめられている。(20),(139),(140)

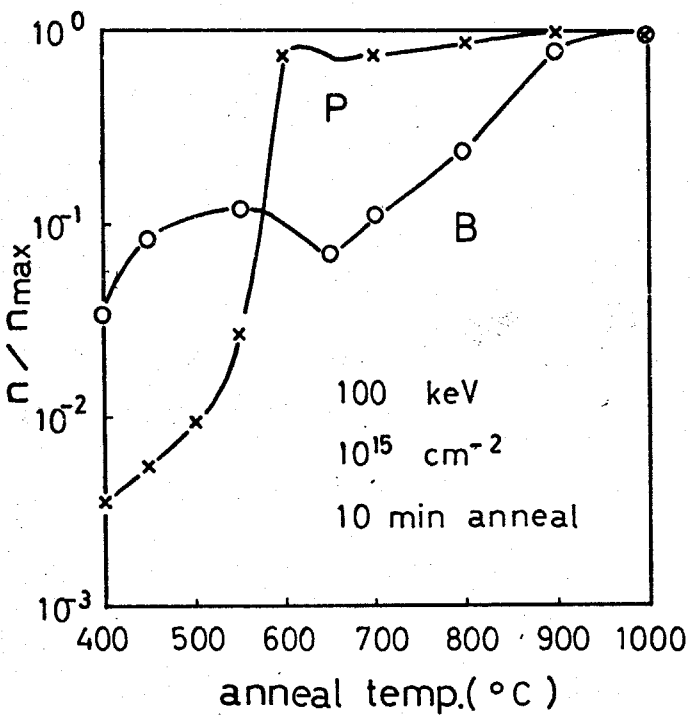


図2-12 Si基板中のBおよびPイオンの等時アニール特性。

このように、キャリア数の回復という観点からだけ眺めた場合には、打込み直後の欠陥数が多いほど、アニール温度が低くなることがわかるが、600°Cのアニールにおいて、キャリア数が急激に回復するのは、欠陥層が非晶質になっている場合であり、打込み量をこれ以上増加しても、キャリア数が回復する温度が600°C以下になることはない。

打込み量が、10^{12}～10^{13}個/cm^2の場合には、欠陥の発生は少なく、Bイオン打込みにおいても逆アニール現象は起らない。[141] このような場合には、比較的低温でもキャリア数の回復の割合は速く、最大プロセス温度450°CでMOSFETを製作した例も報告されている。[142]

(b) 易動度

打込み後500°C程度までのアニールにおいては、易動度は、格子欠陥の影響により、バルクの値よりもかなり小さい。しかしながら、500°C以上のアニールを行なうと、少なくとも室温の測定においては、図2-12のBイオンの場合についても、バルクの値にまで、ほぼ回復する。すなわち、易動度は、電気的性質のうちで、最も低いアニール温度で回復するということができる。

(C) 少数キャリアの拡散長

Bイオン打込み層の少数キャリアの拡散長を、拡散法で製作した同じキャリア濃度、接合深さを持つダイオードと比較すると、1000°Cのアニールにおいても、拡散法で製作したものの値の60～70%となる。[22]

電子顕微鏡の観察結果によると、1000°Cのアニールにおいても、打込み層には多数の転位ループが残っており、[136] これがライフタイムに影響を与えているものと考えることができる。すなわち、トランジスタのベース領域のように、少数キャリアのライフタイムが問題となる用途については、また、拡散法をしのぐ技術とはなっていない。ただし、マイクロ波トランジスタのように、ベース領域が薄く、かつ、その不純物濃度を高くしなくてはならない場合には、従来の拡散法では、そのような要求を満たす不純物分布が得られなかったため、従来のものより、優れたトランジスタが製作されている。

増速拡散

この現象は、イオン注入時、あるいは、注入後のアニール時において、熱平衡状態以上の格子欠陥が存在するために、打込まれたイオンが、通常よりも大きな拡散係数で、拡散する現象である。

この現象は、1、3、1で述べたように、ホット・インプランテーションの場合に顕著に表われるし[16]、また、室温注入後の熱処理によっても、打込みイオンの種類によっては顕著に表われる。[143], [144]

なお、この現象を利用して、あらかじめ拡散法で導入された不純物分布の形状を、高温のプロトン注入により変化させる試み[145]、あるいは、エピタキシャル成長させた高抵抗層にプロトン注入を行ない、基板の不純物を、エピタキシャル層内に選択的に拡散させる試み[1], [94]なども行なわれている。

第3章　モーメント展開を用いた飛程分布の理論解析

Si, GaAsなど単一の物質からなる基板中のイオンの分布を求める基礎方程式は、1963年にLindhardらにより導かれ、LSS理論として知られている。(97)

この方法は、イオンの飛程あるいは射影飛程のモーメントに関する積分方程式をたて、低次の項から順次計算する方法であり、注入イオンの分布は、ガウス分布で近似できることが実験的に求まっているから、通常は、2次のモーメントまでについて計算を行なえばよい。この方法によると、打込みイオンおよび基板の種類が異なっている場合にも、規格化量を用いて、打込みエネルギーと、平均射影飛程あるいは標準偏差との関係を、ほぼ同一な曲線で表わすことができ、しかも、様々な条件で行なわれた実験結果と、かなり良く一致したため、注入イオン分布を求める基礎理論として、広く認められている。

現実的なポテンシャルを仮定して、この基礎方程式から、射影飛程分布の平均値および分散を求める場合には、従来、基礎方程式を、1階微分方程式に展開して求める方法が一般的であり(146)、様々のイオンと基板の組合せについて、計算が行なわれている。(147)

しかしながら、近年、実験の精度が上るにしたがい、実験的に求まる射影飛程分布の分散は、1階微分方程式の解よりも大きくなることが指摘され(11)、(148)しかも、放射化分析法による測定より、この違いが、アニール処理の際の不純物の異常拡散によるものでないことが、明らかとなったので(149)、近似解の精度に関する検討の必要性が生じた。

そこで、本章では、まず第1節で、LSS理論により与えられる基礎方程式について簡単に触れた後、第2節で、微分方程式を用いた解法の精度に関する検討を行ない、一階微分方程式を用いた場合には、分散に大きな誤差

が生じることを示す。

つぎに，第3節では，従来あまり問題にされなかった飛程の高次のモーメントを考慮して，飛程分布のガウス分布からのずれを検討し，平均射影飛程に関する理論値と，実験値との10％程度の違いが説明できる場合のあることを示す。

3.1 解析の仮定および基礎方程式

本節では、Lindhardらにより導かれたイオンの飛程分布、および、射影飛程分布を与える基礎方程式[77]の概要を示す。

3.1.1 解析の仮定

本章の解析に用いられる仮定を以下に示す。

仮定

(1) イオンは基板原子との二体衝突を繰返してエネルギーを失なう。

(2) イオンと基板原子との個々の衝突の間には、相関がないとする。すなわち、イオンは非晶質基板、あるいは、ディチャンネリング状態*で結晶基板に注入されるとする。

(3) 軌道電子の分極、電離などにより失なわれる、非弾性的なエネルギー T_e と、原子核との衝突により失なわれる弾性的なエネルギー T_n とは独立に考慮できる。

(4) イオンの失なうエネルギーのゆらぎは、原子核との衝突によってのみ生じる。すなわち、電子との衝突によるエネルギー損失は空間的に平均化して考慮できる。

(5) 基板原子核の束縛エネルギーは無視する。

(6) イオンは、原子核との衝突によってのみ、進行方向を変える。

---

* 2.3で述べたチャンネリング効果の起っていない状態

仮定(1)は、核阻止能の概念を導く場合に、すでに取入れられている仮定であって、基板中のイオンと原子との衝突を、真空中の1個のイオンと、1個の原子との衝突と等価にみなすものである。

いま、Si基板中にSiイオンが入射した場合を考え、大きなエネルギーを失なう衝突の目安として、衝突径数が式(2.10)で与えられるaに等しい場合を考えると、この値は0.14Åとなる。一方、Siの平均原子間距離は2.7Åであるから、たまたま2個の基板原子に連続して衝突したとしても*、十分別々な衝突と見なすことができ、この仮定は妥当と考えられる。

仮定(2)は、チャンネリング効果などの基板の周期性に基づく現象が起るが、個々の現象が独立事象であることを述べている。仮定(3)は、核阻止能と電子阻止能を分離したことに相当し、仮定(4),(6)は、2.2で述べた仮定と同一である。

仮定(5)は、イオンの静止条件は厳密には、イオンのエネルギーが基板原子の束縛エネルギーと同程度になった場合であるが、イオンの打込みエネルギーに比べて十分小さいので、これを無視するというものである。

---

* 2回連続衝突する確率は、単純には面積の比で与えられ $(0.14/2.7)^2 \approx 1/400$ である

3.1.2 基礎方程式

エネルギーEを持つイオン（原子番号 Z_1, 質量 M_1）の飛程分布および、射影飛程分布に関する基礎方程式は以下のように表わすことができる。ここで、基板は、N種の元素からなる単一層基板と仮定し、元素iの原子番号、質量、単位体積中に含まれる個数をそれぞれ、Z_{2i}, M_{2i}, N_i とする。また、以下の解析において、1種類の元素からなる基板に対しては、添字iを省略する。

飛程分布

飛程分布関数 $P(R,E)$ を以下のように定義すると、飛程Rのm次のモーメント $\langle R^m \rangle$ は式（3.2）となる。

$P(R,E)\,dR$ ：エネルギーEを持つイオンの飛程がRと、$R+dR$ の間にある確率

$$\int_0^\infty P(R,E)\,dR = 1 \qquad (3.1)$$

$$\langle R^m \rangle = \int_0^\infty P(R,E)\,R^m\,dR \qquad (3.2)$$

イオンが基板中を微少距離進んだ場合に、$P(R,E)$ が満たす関係は、式（3.3）で与えられ、式（3.2）を代入すると、$\langle R^m \rangle$ に関する漸化式（3.4）が得られる。(97)

$$\frac{\partial P(R,E)}{\partial R} = \sum_i N_i \int d\sigma_i \{P(R,E-T_i) - P(R,E)\} \qquad (3.3)$$

$$m\langle R^{m-1}(E)\rangle = \sum_i N_i \int d\sigma_i \{\langle R^m(E)\rangle - \langle R^m(E-T_i)\rangle\} \qquad (3.4)$$

ここで，T_i は，イオンが基板原子核，および，軌道電子に与えるエネルギー（$=T_{ni}+T_{ei}$），$d\sigma_i$ は，イオンと基板原子 i との衝突断面積である（$d\sigma_i = d\sigma_{ni} + d\sigma_{ei}$）。

式（3.4）がイオンの飛程分布に関する基礎方程式である。飛程分布として、ガウス分布を仮定する場合には、$m=1$，および 2 についてのみ考慮すればよく，平均飛程 $\langle R \rangle$ および、分散 $\langle \Delta R^2 \rangle (=\langle R^2 \rangle - \langle R \rangle^2)$ に関する式は次式となる。

$$1 = \sum_i N_i \int d\sigma_i \left\{ \langle R(E) \rangle - \langle R(E-T_i) \rangle \right\} \tag{3.5}$$

$$\sum_i N_i \int d\sigma_i \left\{ \langle R(E) \rangle - \langle R(E-T_i) \rangle \right\}^2 = \sum_i N_i \int d\sigma_i \left\{ \langle \Delta R^2(E) \rangle - \langle \Delta R^2(E-T_i) \rangle \right\} \tag{3.6}$$

射影飛程分布

イオンの射影飛程分布は、基板表面に垂直な方向の飛程分布関数と、入射点からの横方向へのずれを表わす分布関数とを用いて、求めることができる[91][150]。射影平均飛程および分散に関する、基礎方程式を以下に示す。

$$1 = \sum_i N_i \int d\sigma_i \left\{ \langle R_p(E) \rangle - \langle R_p(E-T_i) \rangle \cos\varphi_i \right\} \tag{3.7}$$

$$2\langle R_p(E) \rangle = \sum_i N_i \int d\sigma_i \left\{ \langle R_c^2(E) \rangle - \langle R_c^2(E-T_i) \rangle \right\} \tag{3.8}$$

$$2\langle R_p(E) \rangle = \sum_i N_i \int d\sigma_i \left\{ \langle R_r^2(E) \rangle - \left(1 - \frac{3}{2}\sin^2\varphi_i\right) \langle R_r^2(E-T_i) \rangle \right\} \tag{3.9}$$

ここで、イオンが進行方向を変えるのは、仮定(6)より、原子核と衝突する場合だけであるから、$\cos\varphi_i$ は弾性散乱の公式より、次式で与えられる。

$$\cos\varphi_i = \frac{1-\frac{1+\mu_i}{2}\frac{T_{ni}}{E}}{\sqrt{1-T_{ni}/E}} \qquad \left(\mu_i = \frac{M_{2i}}{M_1}\right) \tag{3.10}$$

式(3.8)，(3.9)より，射影飛程分布の分散 $\langle \Delta R_p^2(E)\rangle$ および，動径方向の2次のモーメント $\langle R_\perp^2(E)\rangle$ * は，それぞれ次式で与えられる。

$$\langle \Delta R_p^2(E)\rangle = \left(2\langle R_r^2(E)\rangle + \langle R_c^2(E)\rangle\right)/3 - \langle R_p(E)\rangle^2 \tag{3.11}$$

$$\langle R_\perp^2(E)\rangle = 2\left(\langle R_c^2(E)\rangle - \langle R_r^2(E)\rangle\right)/3 \tag{3.12}$$

基礎方程式の展開

式(3.5)～式(3.9)の飛程分布および、射影飛程分布に関する基礎方程式は，特殊のポテンシャルを除いては，積分方程式の形では，解くことができず，通常，以下の仮定を付け加えて微分方程式に直して解く。

仮定

(7) 基板原子に与えるエネルギー T_i は、イオンの持つエネルギー E に比べて十分小さい

T_i は，T_{ni} と T_{ei} とに分解できるが、このうち、軌道電子に与えるエネルギー T_{ei} については，2.2 にも述べたように、その質量の違いからこの仮定を十分満たすと考えられる。核に与えるエネルギー T_{ni} は，

* 図 2－8 参照

衝突径数が0に近い場合には、$T_{ni} \ll E$ とみなすことはできない。しかしながら、前項の仮定に関して述べたように、このような衝突はめったに起らず、大部分の衝突は、基板原子核に与えるエネルギーが十分小さい衝突であるから、この仮定は、ほぼ妥当と考えられる。

仮定(7)を用いると、式(3.5)の $\langle R(E-T_i)\rangle$ は次式のように展開できる。

$$\langle R(E-T_i)\rangle = \langle R(E)\rangle - T_i \frac{d\langle R(E)\rangle}{dE} + \frac{T_i^2}{2}\frac{d^2\langle R(E)\rangle}{dE^2} - \cdots$$

$$= \langle R(E)\rangle - (T_{ni}+T_{ei})\frac{d\langle R(E)\rangle}{dE} + \frac{T_{ni}^2}{2}\cdot\frac{d^2\langle R(E)\rangle}{dE^2} \qquad (3.13)$$

ここで、右辺の第2式は、軌道電子によるエネルギーのゆらぎを考えないという仮定に基づいて、ゆらぎに寄与する T_{ei}^2 以上の項を無視した。式(3.13)を用いると、式(3.5)は次式となる。

$$1 = \frac{d\langle R\rangle}{dE}\sum_i N_i\{S_{ei}(E)+S_{ni}(E)\} - \frac{1}{2}\cdot\frac{d^2\langle R\rangle}{dE^2}\sum_i N_i\,\Omega_{ni}^2(E) + \cdots \qquad (3.14)$$

ここで、

$$S_{ei}(E) = \int T_{ei}\,d\sigma_{ei}$$

$$S_{ni}(E) = \int T_{ni}\,d\sigma_{ni}$$

$$\Omega_{ni}^2(E) = \int T_{ni}^2\,d\sigma_{ni}$$

である。$S_{ei}(E)$, および $S_{ni}(E)$ は、2.1 で求めた電子阻止能, および, 核阻止能である。また式(3.14)の右辺第2項を省略すると, 式(2.19)と一致する。

式（3.6）～式（3.9）に含まれる，$E-T_i$ の項も同様に展開でき，$\cos\varphi_i$，$\sin^2\varphi_i$ も T_{ni}/E の形で展開できるから，式（3.6）～式（3.9）は，それぞれ，式（3.14）に示すような高階微分方程式に変形できる。また，その係数としては，S_{ei}，S_{ni}，Ω_{ni}^2 のほか，一般に，$\int T_{ni}^m d\sigma_{ni}$ $(m \geq 3)$ という形が含まれる。

3.2 微分方程式を用いた解法の精度に関する検討

従来，式(3.5)～(3.9)の基礎方程式を、式(3.14)のような微分方程式に変形する場合には，2階以上の項をすべて無視し、1階微分方程式として解かれていた。[146] 本節では、この近似解法に関する検討を行ない、1階微分方程式を用いた場合には、射影飛程分布の分散と横方向拡がりに、大きな誤差が含まれることを示す。

まず、近似解法の精度を知るためには、基礎方程式の厳密解を求める必要があるが、この厳密解は、実験事実を最も良く説明すると考えられている核間のポテンシャル（Thomas-Fermi ポテンシャル）を用いては、求めることができない。厳密解が求まるのは、核間のポテンシャルがr^{-S}に比例し、かつ、軌道電子によるエネルギー損失が無視できる場合であることが知られているから、[97],[151],[152] 本節では、r^{-S}に比例するポテンシャルのうち、最も一般的である$S=2$の場合について検討を行なう。

この場合、飛程および射影飛程のモーメントは、高次のものまで求めることができるが、本節では、平均飛程および分散についてのみ考察を行ない、高次モーメントの影響は3・3で考察を行なう。また，2種類の元素からなる基板中の、射影飛程分布に関する積分方程式の厳密解も求められているが、[152] 本節では、解の精度に関する検討を目的としているため，考察の対象を，解析が容易な1種類の元素からなる基板に限定する。

3.2.1 飛程およびエネルギーに関する規格化量の導入

本節では、一種類の元素からなる基板を考え、かつ、電子阻止能を無視するから、2.1.1. の核阻止能の項で導入した規格化量を用いることにより、議論を簡単にすることができる。* すなわち、飛程 R, エネルギー E, 基板原子に与えるエネルギー T_n の規格化量を、それぞれ次式で定義する。

$$\rho = C_R N R \tag{3.15}$$

$$\varepsilon = C_E E \tag{3.16}$$

$$t = C_E^2 E T_n / \gamma \tag{3.17}$$

ここで、それぞれの係数は、2.1.1 に示されている。式(2.8)を用いて、式(3.5)～(3.10)を規格化量で表わした結果を以下に示す。

$$I = \frac{1}{\gamma}\int_0^{\varepsilon^2} \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \left\{ \langle \rho(\varepsilon) - \langle \rho(\varepsilon - \frac{\gamma t}{\varepsilon}) \rangle \right\} \tag{3.5'}$$

$$\int_0^{\varepsilon^2} \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \left\{ \langle \rho(\varepsilon) \rangle - \langle \rho(\varepsilon - \frac{\gamma t}{\varepsilon}) \rangle \right\}^2$$

$$= \int_0^{\varepsilon^2} \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \left\{ \langle \Delta\rho^2(\varepsilon) \rangle - \langle \Delta\rho^2(\varepsilon - \frac{\gamma t}{\varepsilon}) \rangle \right\} \tag{3.6'}$$

$$I = \frac{1}{\gamma}\int_0^{\varepsilon^2} \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \left\{ \langle \rho_p(\varepsilon) \rangle - \langle \rho_p(\varepsilon - \frac{\gamma t}{\varepsilon}) \rangle \cos\varphi \right\} \tag{3.7'}$$

$$2\langle \rho_p(\varepsilon) \rangle = \frac{1}{\gamma}\int_0^{\varepsilon^2} \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \left\{ \langle \rho_c^2(\varepsilon) \rangle - \langle \rho_c^2(\varepsilon - \frac{\gamma t}{\varepsilon}) \rangle \right\} \tag{3.8'}$$

$$2\langle \rho_p(\varepsilon) \rangle = \frac{1}{\gamma}\int_0^{\varepsilon^2} \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \left\{ \langle \rho_r^2(\varepsilon) \rangle - (1 - \frac{3}{2}\sin^2\varphi) \langle \rho_r^2(\varepsilon - \frac{\gamma t}{\varepsilon}) \rangle \right\} \tag{3.9'}$$

$$\cos\varphi = \frac{1 - \frac{1+M}{2}\frac{\gamma t}{\varepsilon^2}}{\sqrt{1 - \gamma t/\varepsilon^2}} \tag{3.10'}$$

---

* 電子阻止能を考慮する場合にも、本節と同一な規格化を行なったほうが、便利な例もある。(97)

とくに、原子核面のポテンシャルが、r^{-2} に比例する Nielsen 形の場合には、$f(t^{1/2})$ は式 (2.12) に示すように一定値となるから、式 (3.5)～(3.9) の微分方程式の係数に表われる $\int T_n^m d\sigma_n$ $(m \geq 1)$ は式 (2.8), (3.17) を用いて次式のように求まる。

$$\int T_n^m d\sigma_n = \frac{C_R \gamma^{m-1} \lambda_2}{C_E^m (2m-1)} \varepsilon^{m-1}$$

$$= \frac{\gamma^{m-1} S_n^0}{2m-1} E^{m-1} \qquad (3.18)$$

ここで、$S_n^0 = \lambda_2 C_R / C_E$ の関係を用いた。

式 (3.5) ～ (3.9) および, 式 (3.5') ～ (3.9') を整理した結果を, 表3-1に示す. 同表においては, 電子阻止能をも考慮してある。

		基礎方程式	規格化量による表現
飛程	平均値	$1 = N\int d\sigma \{\langle R(E)\rangle - \langle R(E-T)\rangle\}$	$1 = \frac{1}{\gamma}\int_0^{\varepsilon^2} \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \{\langle \rho(\varepsilon)\rangle - \langle \rho(\varepsilon - \frac{\gamma t}{\varepsilon})\rangle\} + k'\varepsilon^{\frac{1}{2}} \frac{d\langle\rho\rangle}{d\varepsilon}$
	分散	$N\int d\sigma \{\langle R(E)\rangle - \langle R(E-T)\rangle\}^2 = N\int d\sigma \{\langle \Delta R^2(E)\rangle - \langle \Delta R^2(E-T)\rangle\}$	$\frac{1}{\gamma}\int_0^{\varepsilon^2} \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \{\langle \rho(\varepsilon)\rangle - \langle \rho(\varepsilon - \frac{\gamma t}{\varepsilon})\rangle\}^2 = \frac{1}{\gamma}\int_0^{\varepsilon^2} \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \{\langle \Delta\rho^2(\varepsilon)\rangle - \langle \Delta\rho^2(\varepsilon - \frac{\gamma t}{\varepsilon})\rangle\} + k'\varepsilon^{\frac{1}{2}} \frac{d\langle\Delta\rho^2\rangle}{d\varepsilon}$
射影飛程	平均値	$1 = N\int d\sigma \{\langle R_p(E)\rangle - \langle R_p(E-T)\rangle \cos\varphi\}$	$1 = \frac{1}{\gamma}\int_0^{\varepsilon^2} \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \{\langle \rho_p(\varepsilon)\rangle - \langle \rho_p(\varepsilon - \frac{\gamma t}{\varepsilon})\rangle \cos\varphi\} + k'\varepsilon^{\frac{1}{2}} \frac{d\langle\rho_p\rangle}{d\varepsilon}$
	分散	$2\langle R_p(E)\rangle = N\int d\sigma \{\langle R_c^2(E)\rangle - \langle R_c^2(E-T)\rangle\}$	$2\langle \rho_p(\varepsilon)\rangle = \frac{1}{\gamma}\int_0^{\varepsilon^2} \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \{\langle \rho_c^2(\varepsilon)\rangle - \langle \rho_c^2(\varepsilon - \frac{\gamma t}{\varepsilon})\rangle\} + k'\varepsilon^{\frac{1}{2}} \frac{d\langle\rho_c^2\rangle}{d\varepsilon}$
		$2\langle R_p(E)\rangle = N\int d\sigma \{\langle R_r^2(E)\rangle - (1-\frac{3}{2}\sin^2\varphi)\langle R_r^2(E-T)\rangle\}$	$2\langle \rho_p(\varepsilon)\rangle = \frac{1}{\gamma}\int_0^{\varepsilon^2} \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \{\langle \rho_r^2(\varepsilon)\rangle - (1-\frac{3}{2}\sin^2\varphi)\langle \rho_r^2(\varepsilon - \frac{\gamma t}{\varepsilon})\rangle\} + k'\varepsilon^{\frac{1}{2}} \frac{d\langle\rho_r^2\rangle}{d\varepsilon}$

$k'\varepsilon^{\frac{1}{2}} = C_E S_e(E) / C_R$, $k' = k C_E^{\frac{1}{2}} / C_R$

表 3-1　1種類の元素からなる基板中のイオンの飛程および射影飛程に関する基礎方程式。規格化量による表現において，電子阻止能は1階微分形に展開して示してある。

3.2.2 飛程分布の精度に関する検討

核の相互作用ポテンシャルが r^{-s} に比例し、かつ軌道電子によるエネルギー損失が無視できる場合の、飛程の m 次のモーメントは、式(3.3)より導くことができ、次式のように表わされる[97]　(付録A参照)

$$m\langle r^{m-1}\rangle = \langle r^m\rangle I(\gamma, m, s) \tag{3.19}$$

$$r = \lambda_s \rho / 2\gamma\varepsilon^{2/s} \tag{3.20}^{**}$$

$$I(\gamma, m, s) = \int_0^1 \{1-(1-\gamma y)^{2m/s}\} \frac{dy}{y^{1+1/s}} \tag{3.21}$$

したがって、$s=2$ の場合の飛程分布の規格化された平均値 $\langle\rho\rangle_0$ および分散 $\langle\Delta\rho^2\rangle_0$ は次式となる。ここで添字0は厳密解を示している。

$$\langle\rho\rangle_0 = \varepsilon/\lambda_2 \tag{3.22}$$

$$\langle\Delta\rho^2\rangle_0 = \frac{\gamma}{6-\gamma}\left(\frac{\varepsilon}{\lambda_2}\right)^2 \tag{3.23}$$

つぎに、基礎方程式の展開によって求めた解の精度について検討を行なう。本節の議論では、以下、1階および2階の微分方程式に展開した結果を、厳密解と比較することにする。*

平均飛程および分散に関する基礎方程式 (3.5′), (3.6′) を2階微分方程式に直した結果を次式に示す。

---

* 2階微分方程式による解法は、Briceにより最初に行なわれたが[190]解の精度に関する検討は行なわれていない。

** 式(3.20)で定義される r は、イオンと基板原子核との距離とは無関係である。この r は、式(3.19), (3.20) および付録Aのみに表われる。

$$1 = \lambda_2 \frac{d\langle \rho \rangle}{d\varepsilon} - \frac{\gamma \lambda_2 \varepsilon}{6} \frac{d^2\langle \rho \rangle}{d\varepsilon^2} \tag{3.24}$$

$$\frac{1}{\gamma} \int_0^{\varepsilon^2} \frac{dt}{2t^{3/2}} \left\{ \langle \rho(\varepsilon) \rangle - \langle \rho\left(\varepsilon - \frac{\gamma t}{\varepsilon}\right) \rangle \right\}^2 = \frac{d\langle \Delta\rho^2 \rangle}{d\varepsilon} - \frac{\gamma \varepsilon}{6} \frac{d^2\langle \Delta\rho^2 \rangle}{d\varepsilon^2} \tag{3.25}$$

ここで、式(3.25)の左辺は、式(3.24)の解を代入することにより求まる。

1階微分方程式の解

式(3.24), (3.25)の2階微分項を無視して求めた結果を以下に示す。

$$\langle \rho \rangle_1 = \varepsilon / \lambda_2 \tag{3.26}$$

$$\langle \Delta\rho^2 \rangle_1 = \frac{\gamma}{6} \left(\frac{\varepsilon}{\lambda_2} \right)^2 \tag{3.27}$$

上式と、厳密解とを比較すると、厳密解がエネルギーの1次関数で与えられる平均解は、1階微分方程式を用いて正確な値を求めることができるが、分散は、エネルギーの2乗に比例するため、1階微分方程式を用いては、正確な値を求めることができないことがわかる。

2階微分方程式の解

式(3.24)は、Euler形の微分方程式であり、$\log \varepsilon = t$ と置くことにより、一般解は次式で与えられる。

$$\langle \rho \rangle_{2'} = C_1 + C_2 \varepsilon^{\frac{6}{\gamma}+1} + \varepsilon/\lambda_2 \qquad (3.28)$$

ここで、C_1, C_2 は積分定数であり、$\varepsilon=0$ で $\langle \rho \rangle_{2'}=0$ の条件より、$C_1=0$ となる。また、厳密解との対応から C_2 も 0 でなくてはならないが、数学的には簡単に 0 になる条件は求まらない。

分散についても全く同様であり、式（3.25）の左辺に $\rho=\varepsilon/\lambda_2$ を代入して求めた結果は次式となる。

$$\langle \Delta\rho^2 \rangle_{2'} = C_1 + C_2 \varepsilon^{\frac{6}{\gamma}+1} + \frac{\gamma}{6-\gamma}\left(\frac{\varepsilon}{\lambda_2}\right)^2 \qquad (3.29)$$

上式より、特解は厳密解と一致していることが分るが、この場合にも、やはり C_2 を 0 とする数学的な境界条件を見付けることができない。

このことは、一般のポテンシャルを仮定して、数値解析により、2階微分方程式を求める場合に大きな問題となる。事実 Thomas-Fermi ポテンシャルを用いた2階微分方程式を、便宜的に $\varepsilon=0$ で $\rho=0$, $d\rho/d\varepsilon=0$ と置いて、通常行なわれている数値解析法で求めると、解が発散することが明らかになった。(33)

そこで、以下、簡単な境界条件だけを用いて求められた2階微分方程式の近似解(33)の精度に関する検討を、解析的に行なう。

式（3.24），（3.25）の近似解は，以下のように与えられる。すなわち，両式において，2階微分項の寄与は小さいと考えて，2階微分項の $\langle \rho \rangle$ および，$\langle \Delta\rho^2 \rangle$ に1階微分方程式の解を代入する。

このように置くと、式 (3.24), (3.25) は再び、1階微分方程式になるから、$\xi = 0$ で、$\langle \rho \rangle = \langle \Delta \rho^2 \rangle = 0$ という境界条件を用いるだけで解が求まる。結果を次式に示す。

$$\langle \rho \rangle_2 = \xi / \lambda_2 \tag{3.30}$$

$$\langle \Delta \rho^2 \rangle_2 = \frac{\gamma}{6}\left(1 + \frac{\gamma}{6}\right)\left(\frac{\xi}{\lambda_2}\right)^2 \tag{3.31}$$

上式より、平均飛程に関しては、1階および2階微分方程式の解は、ともに、厳密解に一致するが、分散は、1階微分方程式を用いた場合には、厳密解を γ について1次まで展開した値、2階微分方程式を用いた場合には、γ について2次まで展開した値になっていることがわかる。

図3-1 に M_1/M_2 に対する、$\sqrt{\langle \Delta R^2 \rangle_1}/\sqrt{\langle \Delta R^2 \rangle_0}$, $\sqrt{\langle \Delta R^2 \rangle_2}/\sqrt{\langle \Delta R^2 \rangle_0}$ の変化を示す。同図より、誤差は、$M_1 = M_2$ の場合に最大となり、1階微分方程式の場合、約 8.7% あった誤差が、近似的な2階微分方程式を用いることにより、約 1.4% となることがわかる。

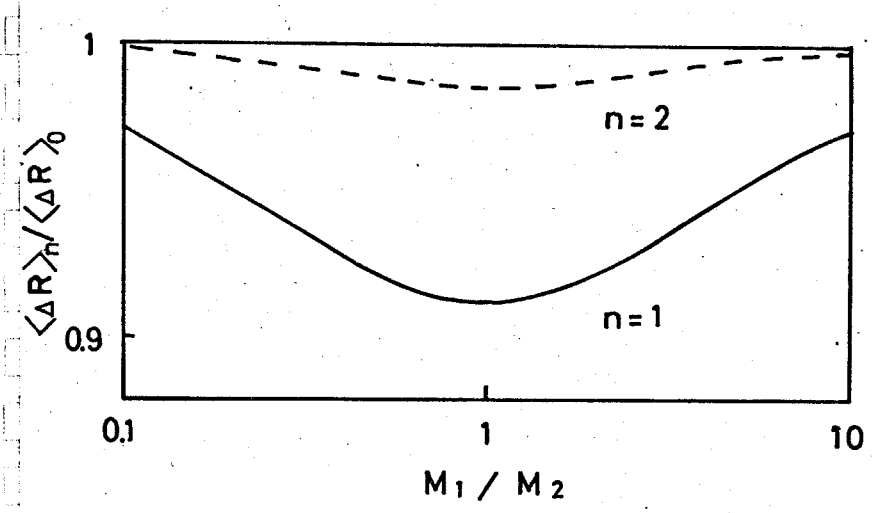


図3-1 1階および2階微分方程式方程式の解と厳密解との比較。(飛程分布の標準偏差。) 図中の $\langle \Delta R \rangle$ は $\sqrt{\langle \Delta R^2 \rangle}$ を示している。 (r^{-2} pot.)*

* 以下の図表中, r^{-2} pot. は Nielsen 形ポテンシャルを用いた結果を, また T-F pot. は Thomas-Fermi ポテンシャルを用いた結果を示す。

3.2.3 射影飛程分布の精度に関する検討

原子核周のポテンシャルが r^{-2} に比例し、軌道電子によるエネルギー損失が無視できる場合の、射影飛程分布に関する諸量の厳密解は、以下のようになることが示されている。[151],[152]

$$\langle \rho_p \rangle_0 = A\ (\varepsilon/\lambda_2) \tag{3.32}$$

$$\langle \rho_c^2 \rangle_0 = B\ (\varepsilon/\lambda_2)^2 \tag{3.33}$$

$$\langle \rho_r^2 \rangle_0 = C\ (\varepsilon/\lambda_2)^2 \tag{3.34}$$

したがって、式 (3.32)～(3.34) を式 (3.7′)～(3.9′) に代入すると、次式となる。

$$1 = \frac{A}{\gamma}\int_0^{\varepsilon^2}\frac{dt}{2t^{3/2}}\left\{\varepsilon - \left(\varepsilon - \frac{\gamma t}{\varepsilon}\right)\cos\varphi\right\} \tag{3.35}$$

$$2A\varepsilon = \frac{B}{\gamma}\int_0^{\varepsilon^2}\frac{dt}{2t^{3/2}}\left\{\varepsilon^2 - \left(\varepsilon - \frac{\gamma t}{\varepsilon}\right)^2\right\} \tag{3.36}$$

$$2A\varepsilon = \frac{C}{\gamma}\int_0^{\varepsilon^2}\frac{dt}{2t^{3/2}}\left\{\varepsilon^2 - \left(\varepsilon - \frac{\gamma t}{\varepsilon}\right)^2\left(1 - \frac{3}{2}\sin^2\varphi\right)\right\} \tag{3.37}$$

ここで、$y = \frac{t}{\varepsilon^2}$ とおくことにより、A, B, C は ε に無関係な次式で与えられる。

$$A = 2\gamma \Big/ \int_0^1 y^{-\frac{3}{2}}\left\{1 - \sqrt{1-\gamma y}\left(1 - \frac{1+\mu}{2}\gamma y\right)\right\}dy \tag{3.38}$$

$$B = 4\gamma A \Big/ \int_0^1 y^{-\frac{3}{2}}\left\{1 - (1-\gamma y)^2\right\}dy$$

$$= A/(1 - \gamma/6) \tag{3.39}$$

$$C = 4\gamma A \Big/ \int_0^1 y^{-\frac{3}{2}}\left[1 - (1-\gamma y)^2\left\{\frac{3}{2}\frac{\left(1 - \frac{1+\mu}{2}\gamma y\right)^2}{1-\gamma y} - \frac{1}{2}\right\}\right]dy$$

$$= \frac{A}{1 + \frac{3}{4}\mu - \frac{1}{12}\left\{2 + 3\mu + \frac{3}{4}(1+\mu)^2\right\}\gamma + \frac{3}{80}(1+\mu)^2\gamma^2} \tag{3.40}$$

Aの分母は部分積分を用いて以下のように計算できる。

$$(\text{分母}) = -2\left\{1-\sqrt{1-\gamma}\left(1-\frac{1+\mu}{2}\gamma\right)\right\} + \gamma\int_0^1 \frac{2+\mu-\frac{3}{2}(1+\mu)\gamma y}{\sqrt{y-\gamma y^2}}\,dy$$

$$= -2 + 2\sqrt{1-\gamma} + \frac{1+\mu}{2}\gamma\sqrt{1-\gamma}$$

$$+ \frac{5+\mu}{4}\sqrt{\gamma}\left\{\frac{\pi}{2} - \sin^{-1}(1-2\gamma)\right\} \qquad (3.41)$$

従来の結果は、r^{-s}ポテンシャルに対して、Aを不完全ベータ関数の組合せで表現してあるが、[152] 式(3.41)より、r^{-2}ポテンシャルの場合には、Aが初等関数で表現できることがわかった。

また、射影飛程分布の分散、および、動径方向の2次のモーメントの規格化値 $\langle\Delta\rho^2\rangle$, $\langle\rho_\perp^2\rangle$ は、式(3.11), (3.12)より、それぞれ次式となる。

$$\langle\Delta\rho_p^2\rangle = \left(\frac{2C+B}{3} - A^2\right)\left(\frac{\varepsilon}{\lambda_2}\right)^2 \qquad (3.42)$$

$$\langle\rho_\perp^2\rangle = \frac{2}{3}(B-C)\left(\frac{\varepsilon}{\lambda_2}\right)^2 \qquad (3.43)$$

つぎに、式(3.43)から、イオンの横方向拡がりを表わす量を求める。いま、イオンの入射方向をZ軸にとり、Z軸に直角にX軸およびY軸を考えると、$\rho_\perp^2 = x^2+y^2$ の関係、および、動径方向の分布は対称となるという条件より以下の関係が得られる。

$$\langle\rho_\perp^2\rangle_0 = \langle x^2\rangle_0 + \langle y^2\rangle_0 \qquad (3.44)$$

$$\langle x^2\rangle_0 = \langle y^2\rangle_0 \qquad (3.45)$$

$$\langle x\rangle_0 = \langle y\rangle_0 = 0 \qquad (3.46)$$

したがって、横方向分散 $\langle \Delta x^2 \rangle$, および $\langle \Delta y^2 \rangle$ は次式となる。

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \langle \Delta y^2 \rangle = \langle p_\perp^2 \rangle / 2 = \frac{1}{3}(B-C)\left(\frac{\varepsilon}{\lambda_2}\right)^2 \qquad (3.47)$$

図 3-2 に、$\langle R_p \rangle_0 / \langle R \rangle_0$, $\sqrt{\langle \Delta R_p^2 \rangle_0} / \langle \Delta R^2 \rangle_0$ を M_2/M_1 の関数として示す。また図 3-3 に $\sqrt{\langle \Delta R_p^2 \rangle_0} / \langle R_p \rangle_0$, $\sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle_0} / \langle R_p \rangle_0$ および $\sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle_0} / \langle \Delta R_p^2 \rangle_0$ の変化を示す。

図 3-2より, $M_1/M_2 \geq 3$ の場合には $\langle R_p \rangle_0 / \langle R \rangle_0$ と $\sqrt{\langle \Delta R_p^2 \rangle_0} / \langle \Delta R^2 \rangle_0$ がほぼ等しいから、平均飛程と平均射影飛程の比でグラフをスケーリングすることにより、飛程分布から射影飛程分布を求められることがわかる。軽いイオンに対しては、このようなスケーリングはできない。

また、図 3-3 より、イオンの横方向拡がりは、縦方向拡がりに比べて常に小さく、イオンが軽い場合には、球形に近い分布となるが、イオンの質量が重くなるにしたがって、イオンが大きく曲げられる確率が減って、縦方向に長い分布となることがわかる。

ただし、軌道電子によるエネルギー損失が支配的となると, イオンの横方向拡がりのほうが大きくなる場合もある。(33)

つぎに、式 (3.7′)～(3.9′) を2階微分方程式に展開した結果を示す。

$$-\gamma_1 \varepsilon \frac{d^2\langle \rho_p \rangle}{d\varepsilon^2} + \beta_1 \frac{d\langle \rho_p \rangle}{d\varepsilon} + \alpha_1 \frac{\langle \rho_p \rangle}{\varepsilon} = 1 \qquad (3.48)$$

$$-\gamma_2 \varepsilon \frac{d^2\langle \rho_c^2 \rangle}{d\varepsilon^2} + \beta_2 \frac{d\langle \rho_c^2 \rangle}{d\varepsilon} = 2\langle \rho_p \rangle \qquad (3.49)$$

$$-\gamma_3 \varepsilon \frac{d^2\langle \rho_r^2 \rangle}{d\varepsilon^2} + \beta_3 \frac{d\langle \rho_r^2 \rangle}{d\varepsilon} + \alpha_3 \frac{\langle \rho_r^2 \rangle}{\varepsilon} = 2\langle \rho_p \rangle \qquad (3.50)$$

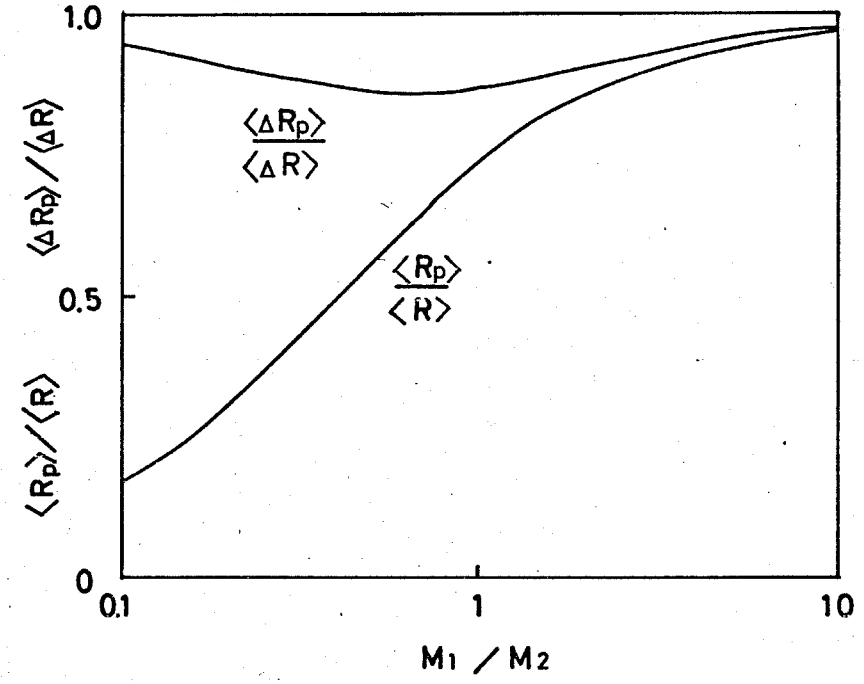


図3-2 平均値および標準偏差に関する飛程と射影飛程の比。* (r^{-2} pot.)

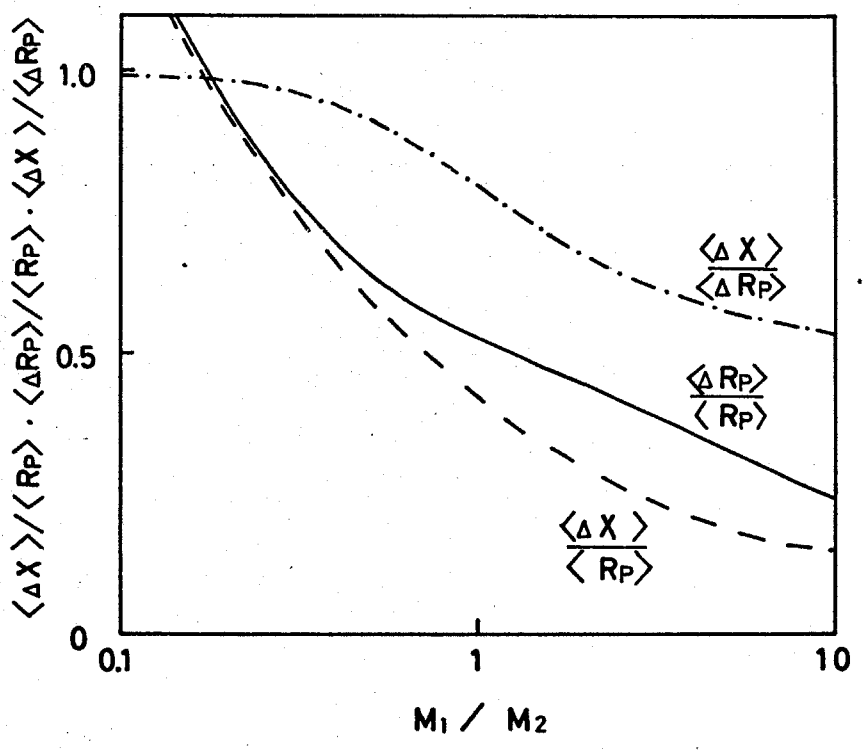


図3-3 射影飛程分布に関する諸量の関係 (r^{-2} pot.)*

* 図3-2, 3-3 では添字0が省略してある。
また ⟨ΔR⟩, ⟨ΔRp⟩, ⟨ΔX⟩ は, それぞれ, $\sqrt{\langle \Delta R^2 \rangle}$, $\sqrt{\langle \Delta R_p^2 \rangle}$, $\sqrt{\langle \Delta X^2 \rangle}$ を示している。

ここで、係数 $\gamma_1, \beta_1 \cdots \alpha_3$ は、表 3－2 に示す。

1階微分方程式の解

まず、式（3.48）より、$\gamma_1 = 0$ とおいて、$\langle \rho_p \rangle_1$ は次式となる。

$$\langle \rho_p \rangle_1 = \frac{1}{\beta_1 + \alpha_1} \varepsilon = \frac{1}{1 - \frac{\mu\gamma}{6} + \frac{\mu}{2}} \left(\frac{\varepsilon}{\lambda_2} \right) \qquad (3.51)$$

ここで、右辺第2式は、表3-2の α_1, β_1 のうち、1階微分方程式を用いた通常の解析[146]に表われる項のみを示したものである。式（3.51）を、式（3.49）、（3.50）に代入し、$\gamma_2 = \gamma_3 = 0$ と置いて求めた $\langle \rho_c^2 \rangle_1, \langle \rho_r^2 \rangle$ を以下に示す。ここで、右辺第2式は、同様に、通常の1階微分方程式の解に表われる項のみを示した結果であり、以下の検討は、第2式で行なう。

$$\langle \rho_c^2 \rangle_1 = \frac{\varepsilon^2}{\beta_2 (\beta_1 + \alpha_1)} = \frac{1}{1 - \frac{\mu\gamma}{6} + \frac{\mu}{2}} \left(\frac{\varepsilon}{\lambda_2} \right)^2 \qquad (3.52)$$

$$\langle \rho_r^2 \rangle_1 = \frac{\varepsilon^2}{(\beta_3 + \alpha_3/2)(\beta_1 + \alpha_1)}$$

$$= \frac{1}{(1 - \frac{\mu\gamma}{6} + \frac{\mu}{2})(1 - \frac{\mu\gamma}{2} + \frac{3}{4}\mu)} \left(\frac{\varepsilon}{\lambda_2} \right)^2 \qquad (3.53)$$

上式を、式（3.42）、（3.43）、（3.47）に代入することにより $\langle \Delta p_p^2 \rangle_1, \langle \Delta x^2 \rangle_1$ を求めることができる。

2階微分方程式の解

式（3.48）～（3.50）は、飛程分布の平均値および分散が満たした微分方程式と同一の形をしており、解析的に解を求めることができる。しかしながら、この場合にもやはり積分定数を、数学的に簡単に決めること

	積分形	展開形
γ_1	$\frac{\lambda_2\gamma}{2}\cdot\frac{1}{\varepsilon^3}\int_0^{\varepsilon^2} t^2\cdot\cos\varphi\,\frac{dt}{2t^{3/2}}$	$\frac{\lambda_2\gamma}{2}\cdot\left(\frac{1}{3}-\frac{\mu\gamma}{10}+\frac{\gamma^2(1-2\mu)}{56}+\cdots\right)$
β_1	$\lambda_2\cdot\frac{1}{\varepsilon}\int_0^{\varepsilon^2} t\cdot\cos\varphi\cdot\frac{dt}{2t^{3/2}}$	$\lambda_2\left(1-\frac{\mu\gamma}{6}+\frac{\gamma^2(1-2\mu)^2}{40}+\cdots\right)$
α_1	$\frac{\lambda_2}{\gamma}\cdot\varepsilon\int_0^{\varepsilon^2}(1-\cos\varphi)\frac{dt}{2t^{3/2}}$	$\frac{\lambda_2}{2}\left(\mu-\frac{\gamma(1-2\mu)}{12}-\frac{\gamma^2(2-3\mu)}{40}+\cdots\right)$
γ_2	$\frac{\lambda_2\gamma}{2}\cdot\frac{1}{\varepsilon^3}\int_0^{\varepsilon^2} t^2\cdot\frac{dt}{2t^{3/2}}$	$\frac{\lambda_2\gamma}{6}$
β_2	$\lambda_2\cdot\frac{1}{\varepsilon}\int_0^{\varepsilon^2} t\cdot\frac{dt}{2t^{3/2}}$	λ_2
γ_3	$\frac{\lambda_2\gamma}{2}\cdot\frac{1}{\varepsilon^3}\int_0^{\varepsilon^2} t^2\left(1-\frac{3}{2}\sin^2\varphi\right)\frac{dt}{2t^{3/2}}$	$\frac{\lambda_2\gamma}{2}\left(\frac{1}{3}-\frac{3\mu\gamma}{10}+\frac{3\gamma^2(1-\mu)^2}{56}+\cdots\right)$
β_3	$\lambda_2\cdot\frac{1}{\varepsilon}\int_0^{\varepsilon^2} t\left(1-\frac{3}{2}\sin^2\varphi\right)\frac{dt}{2t^{3/2}}$	$\lambda_2\left(1-\frac{\mu\gamma}{2}+\frac{3\gamma^2(1-\mu)^2}{40}+\cdots\right)$
α_3	$\frac{\lambda_2}{\gamma}\cdot\varepsilon\int_0^{\varepsilon^2}\frac{3}{2}\cdot\sin^2\varphi\cdot\frac{dt}{2t^{3/2}}$	$\frac{\lambda_2}{2}\left(3\mu-\frac{\gamma(1-\mu)^2}{4}-\frac{3\gamma^2(1-\mu)^2}{20}+\cdots\right)$

$$\cos\varphi = 1-\frac{\mu}{2}\cdot\frac{\gamma t}{\varepsilon^2}+\left(\frac{1-2\mu}{8}\right)\left(\frac{\gamma t}{\varepsilon^2}\right)^2+\frac{2-3\mu}{16}\cdot\left(\frac{\gamma t}{\varepsilon^2}\right)^3+\cdots$$

$$\sin^2\varphi = \mu\frac{\gamma t}{\varepsilon^2}-\frac{(1-\mu)^2}{4}\left(\frac{\gamma t}{\varepsilon^2}\right)^2-\frac{(1-\mu)^2}{4}\left(\frac{\gamma t}{\varepsilon^2}\right)^3+\cdots$$

表3-2 射影飛程分布に関する2階微分方程式の係数 (r^{-2} pot.)

ができないので、ここでも，数値解析法を用いても安定な解の得られる近似法により求めた解の精度を議論することにする。

まず、$\langle \rho_p \rangle_2$ を求めるためには、$\langle \rho_p \rangle_1$ を式(3.48) の左辺第1項に代入すればよい。結果は $\langle \rho_p \rangle_1$ と同一の形式になるが、ここでは、α_1, β_1 について、表3-1 に示してある展開項をすべて計算するので、それだけ近似度が高くなる。

$$\langle \rho_p \rangle_2 = \frac{1}{\beta_1 + \alpha_1} \varepsilon \tag{3.54}$$

つぎに、式 (3.49), (3.50) の左辺第1項に $\langle \rho_c^2 \rangle_1$, $\langle \rho_r^2 \rangle_1$ を代入し、右辺に式 (3.54) を代入することにより、$\langle \rho_c^2 \rangle_2$, $\langle \rho_r^2 \rangle_2$ を求めることができる。

$$\langle \rho_c^2 \rangle_2 = \frac{\varepsilon^2}{\beta_2 (\beta_1 + \alpha_1)} \left(1 + \frac{\gamma_2}{\beta_2} \right) \tag{3.55}$$

$$\langle \rho_r^2 \rangle_2 = \frac{\varepsilon^2}{(\beta_3 + \alpha_3/2)(\beta_1 + \alpha_1)} \left(1 + \frac{\gamma_3}{\beta_3 + \alpha_3/2} \right) \tag{3.56}$$

上式より $\langle \rho_c^2 \rangle_2$, $\langle \rho_r^2 \rangle_2$ は、個々の係数の精度が良くなるばかりではなく、1階微分方程式の結果には表われない新しい項が、加わることがわかる。

図 3-4 に、平均射影飛程、射影標準偏差および横方向拡がりの、厳密解と、1階および、2階微分方程式の解との比を示す。

同図より、1階微分方程式の解は計算された範囲において、平均値で約 6%，標準偏差について 70%，横方向拡がりについて 28% の誤差があり、とくに標準偏差に関しては、入射イオンが重くなると、第1近似としても、用いる

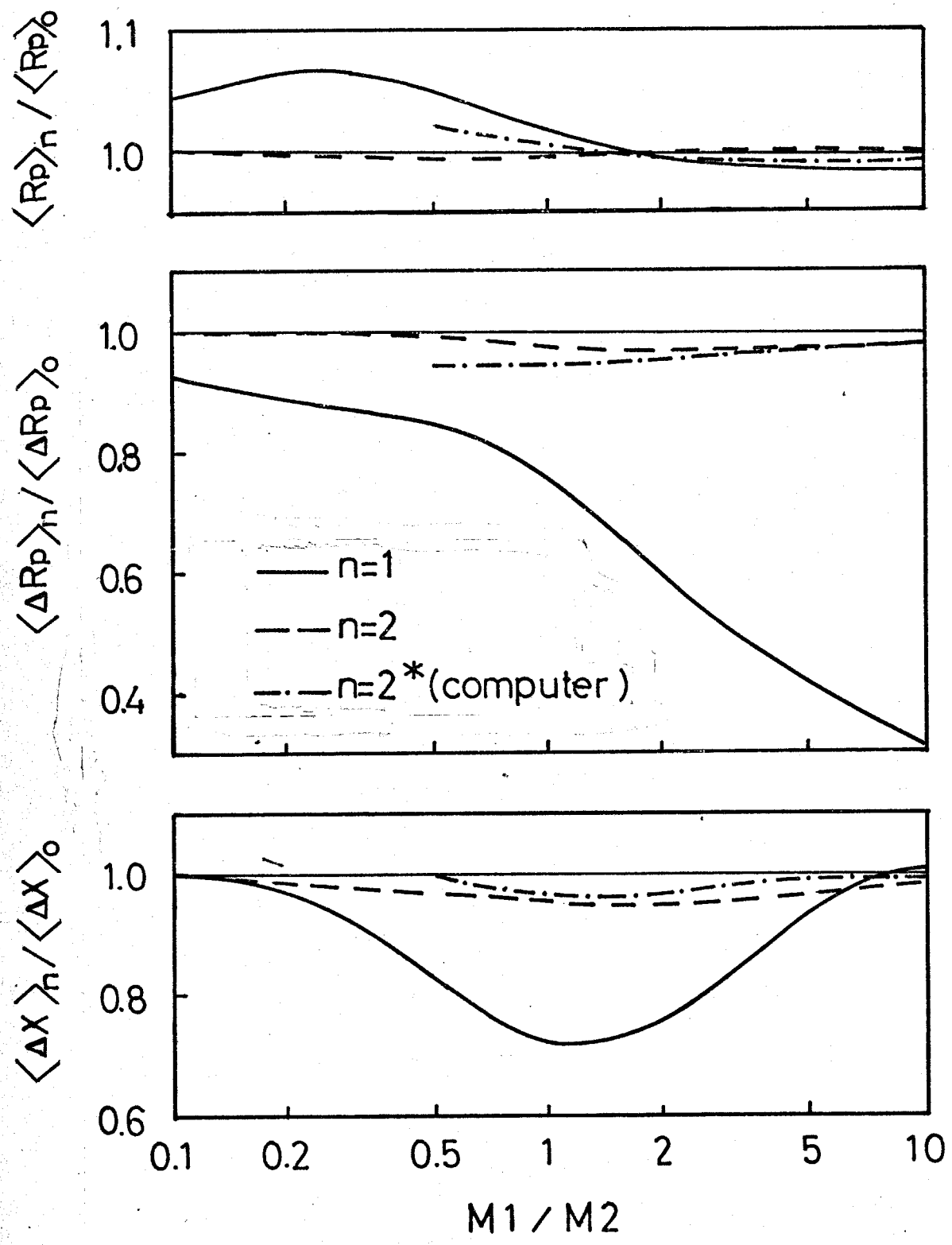


図3-4　平均射影距程、射影標準偏差、および横方向拡がりに関する厳密解と、1階および2階微分方程式の解との比。(r^{-2} pot.)

ことができないことが、明らかとなる。

一方、2階微分方程式を用いた場合の、最大の誤差は、それぞれ 0.7%, 3.1%, 5.4% であるから、工学的には、2階微分方程式の近似解法により、十分有用な射影飛程分布を求められると結論できる。

なお、同図の一点鎖線は、数値解析に用いる計算機プログラムの精度を検討したものである。(33)

以上の解析は、数学的に最も簡単なポテンシャルを仮定したものであるが、より現実的と考えられている Thomas-Fermi ポテンシャルを仮定した場合には、飛程とエネルギーとが比例せず、2階微分項の効果はより顕著に表われると考えられる。したがって、1階微分方程式を用いて計算されている平均射影飛程および標準偏差に関するテーブル(147)は、正確な値を示していないと結論できる。

表3-3は、飛程、および射影飛程に関する厳密解と、1階および2階微分方程式の解を、まとめたものである。

			厳密解	1階微分方程式の解	2階微分方程式の解
飛程	平均値	$\langle \rho \rangle$	$\frac{\varepsilon}{\lambda_2}$	$\frac{\varepsilon}{\lambda_2}$	$\frac{\varepsilon}{\lambda_2}$
	分散	$\langle \Delta\rho^2 \rangle$	$\frac{\gamma}{6-\gamma}\left(\frac{\varepsilon}{\lambda_2}\right)^2$	$\frac{\gamma}{6}\left(\frac{\varepsilon}{\lambda_2}\right)^2$	$\frac{\gamma}{6}\left(1+\frac{\gamma}{6}\right)\left(\frac{\varepsilon}{\lambda_2}\right)^2$
射影飛程	平均値	$\langle \rho_p \rangle$	$A\left(\frac{\varepsilon}{\lambda_2}\right)$	$\frac{1}{1-\frac{\mu\gamma}{6}+\frac{\mu}{2}}\left(\frac{\varepsilon}{\lambda_2}\right)$	$\frac{1}{\beta_1+\alpha_1}\varepsilon$
	分散	$\langle \rho_c^2 \rangle$	$B\left(\frac{\varepsilon}{\lambda_2}\right)^2$	$\frac{1}{1-\frac{\mu\gamma}{6}+\frac{\mu}{2}}\left(\frac{\varepsilon}{\lambda_2}\right)^2$	$\frac{1+\gamma_2/\beta_2}{\beta_2(\beta_1+\alpha_1)}\varepsilon^2$
		$\langle \rho_r^2 \rangle$	$C\left(\frac{\varepsilon}{\lambda_2}\right)^2$	$\frac{1}{1-\frac{\mu\gamma}{6}+\frac{\mu}{2}}\cdot\frac{1}{1-\frac{\mu\gamma}{2}+\frac{3\mu}{4}}\left(\frac{\varepsilon}{\lambda_2}\right)^2$	$\frac{\varepsilon^2}{(\beta_3+\alpha_3/2)(\beta_1+\alpha_1)}\left(1+\frac{\gamma_3}{\beta_3+\alpha_3/2}\right)$

A, B, C → 式 (3.38) ~ (3.41)

$\alpha_1, \beta_1, \cdots \gamma_3$ → 表 3-2

表 3-3 飛程および射影飛程に関する厳密解と，1階および2階微分方程式の解の比較 (r^{-2} pot.)

3.3 高次モーメントの影響

前節までの議論は、すべて、飛程分布としてガウス分布を仮定して行なってきた。ガウス分布の仮定はある近似として実験結果を良く説明することが知られており、30 keV以上のエネルギーでBイオンをSi基板に打込んだ場合に、実験的に得られる射影飛程分布は、2階微分方程式を用いてLSS理論から求まる平均値、および分散と定量的にも良く一致することが示された。(122)

しかしながら、Si基板にBイオンを打込んだ場合には、

(1) 平均射影飛程が、LSS理論よりも浅いこと、

(2) キャリア分布の深い部分に指数的に減少する分布の尾ができること

など、分布がガウス分布からずれることが実験的に確かめられた。(11),(52),(153)~(155)

このような分布の尾が存在すると、イオン注入法によりPn接合を作る場合に、接合位置がガウス分布の仮定により理論的に求めた値から、大きく変化し、半導体素子製作上、大きな問題となる。この尾ができる原因としては、格子欠陥に起因する異常拡散、あるいは打込み時のチャンネリング効果などが考えられているが、ここでは、より本質的な原因として考えられる打込み時の、イオン分布のガウス分布からのずれを、飛程の高次のモーメントを用いて検討し、実験結果との対応を試みる。

3.3.1 飛程分布の高次モーメントの導出

本項では、飛程分布の高次モーメントの導出法と、高次のモーメントを用いて、ガウス分布を補正する方法について述べる。

飛程のm次モーメントは、式（3.4）より一般のポテンシャルについて計算できるが、正確な値を求めるためには、式（3.4）を少くともm次の微分方程式に展開する必要があり、実際の計算は容易ではない。ここでは、そのような困難を避けるため、各次数のモーメントが解析的に求まる場合についてのみ考察を行なう。

このような、近似的な方法を用いても，それぞれの次数のモーメントが、イオン分布の形状にどの程度寄与するかの目安が得ることができよう。

各次数のモーメントが解析的に得られるのは、3.2.2で示したように、核の相互作用ポテンシャルがγ^{-s}で与えられ、さらに、軌道電子によるエネルギー損失が無視できる場合である。ここで$S=2$の場合を考えると、規格化された飛程のm次のモーメント$\langle \rho^m \rangle$は式(3.19)～(3.21)より次式となる。

$$\langle \rho^m \rangle = \frac{2m\gamma\varepsilon}{\lambda_2 I(\delta, m, 2)} \langle \rho^{m-1} \rangle \qquad (3.57)$$

つぎに，m次のモーメントまでが求まった場合に，ガウス分布を補正する方法としては，とくに収束の速い級数としてEdgeworthの漸近形が知られており，飛程分布への応用も試みられている。[156],[152] したがって，本節の解析も，以下，次式に示すEdgeworthの漸近形を用いて行なうことにする。

$$F(\rho) = \frac{1}{\sqrt{\langle \Delta\rho^2 \rangle}} \left[Z(x) - \left\{ \frac{\eta_1}{6} Z^{(3)}(x) \right\} \right.$$
$$+ \left\{ \frac{\eta_2}{24} Z^{(4)}(x) + \frac{\eta_1^2}{72} Z^{(6)}(x) \right\}$$
$$\left. - \left\{ \frac{\eta_3}{120} Z^{(5)}(x) + \frac{\eta_1 \eta_2}{144} Z^{(7)}(x) + \frac{\eta_1^3}{1296} Z^{(9)}(x) \right\} \right.$$
$$+ [\text{higher terms}] \qquad (3.58)$$

ここで, $x = (\rho - \langle\rho\rangle)/\sqrt{\langle \Delta\rho^2 \rangle}$, $Z(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}$, $Z^{(n)}(x) = d^n Z(x)/dx^n$, $\eta_1 = \mu_3/\mu_2^{3/2}$, $\eta_2 = \mu_4/\mu_2^2 - 3$, $\eta_3 = \mu_5/\mu_2^{5/2} - 10\mu_3/\mu_2^{3/2}$, $\mu_n = \langle (\rho - \langle\rho\rangle)^n \rangle$ である。

式(3.57)を用いて, 各補正項の係数を計算した結果を, 図3-5に示す。同図より, 核阻止能だけを考慮した場合には, 非1補正項は, 常に正となり, 通常のイオン注入に用いられるイオンと基板との組合わせに対しては, ほぼ一定とみなせることがわかる。

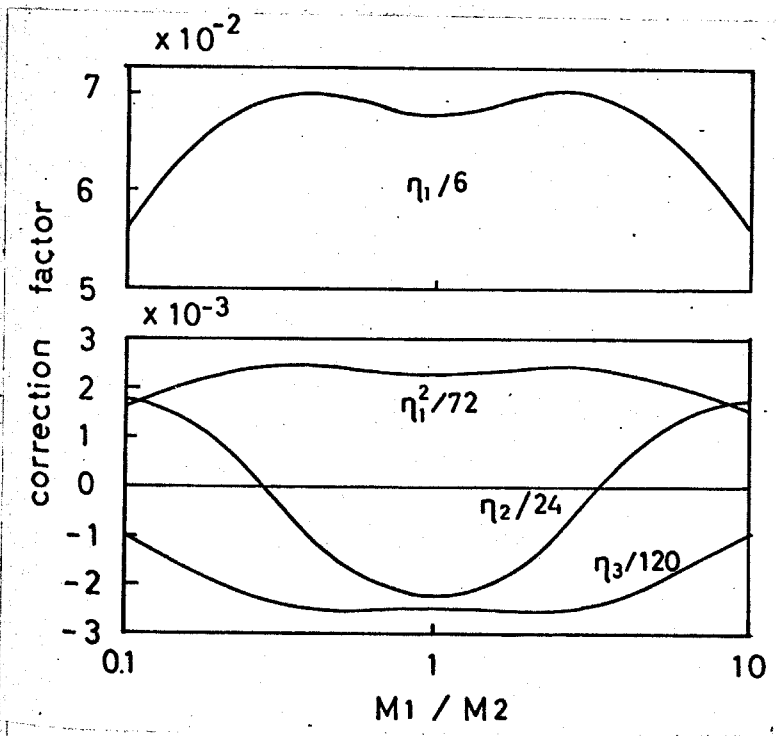


図3-5 Edgeworthの漸近形における補正項係数のイオン質量による変化 (r^{-2} pot.)

東京工業大学 317758

図3-6は$M_1=M_2$の場合について、基本となるガウス分布と、式(3.58)中の、それぞれ中カッコで示した次1～次3補正項の大きさを比較したものである。また、図3-7は、それらを合成したものである。

図3-6, 3-7より、

(1)次1補正項により、平均飛程$\langle\rho\rangle$よりも表面側に分布の最大値がくること。

(2)次3補正項(飛程の5次のモーメント$\langle\rho^5\rangle$までを含む項)までを考慮すれば、十分正確な飛程分布を得ることができるが、近似的に、次1補正項(飛程の3次のモーメント$\langle\rho^3\rangle$までを含む項)のみを考慮した場合にも、ガウス分布からのずれの目安を得られることがわかる。

また、同図および、図3-5より、核衝突のみを考慮した場合には、入射イオンの種類に無関係に、次1補正項の係数η_1は正となり、平均飛程よりも表面側に分布のピークがきたし、また、基板の深い部分で、ガウス分布よりも尾を引く分布となることがわかる。

この傾向は、先に述べたSi中のPイオンの分布の実験結果と一致しており、Si基板に打込まれたPイオンの分布の実験結果は、飛程の高次モーメントを考えることにより、ある程度説明できることが予想される。実験結果との定量的比較を行なうため、次項で、射影飛程分布に対する高次モーメントの影響について検討を行なう。

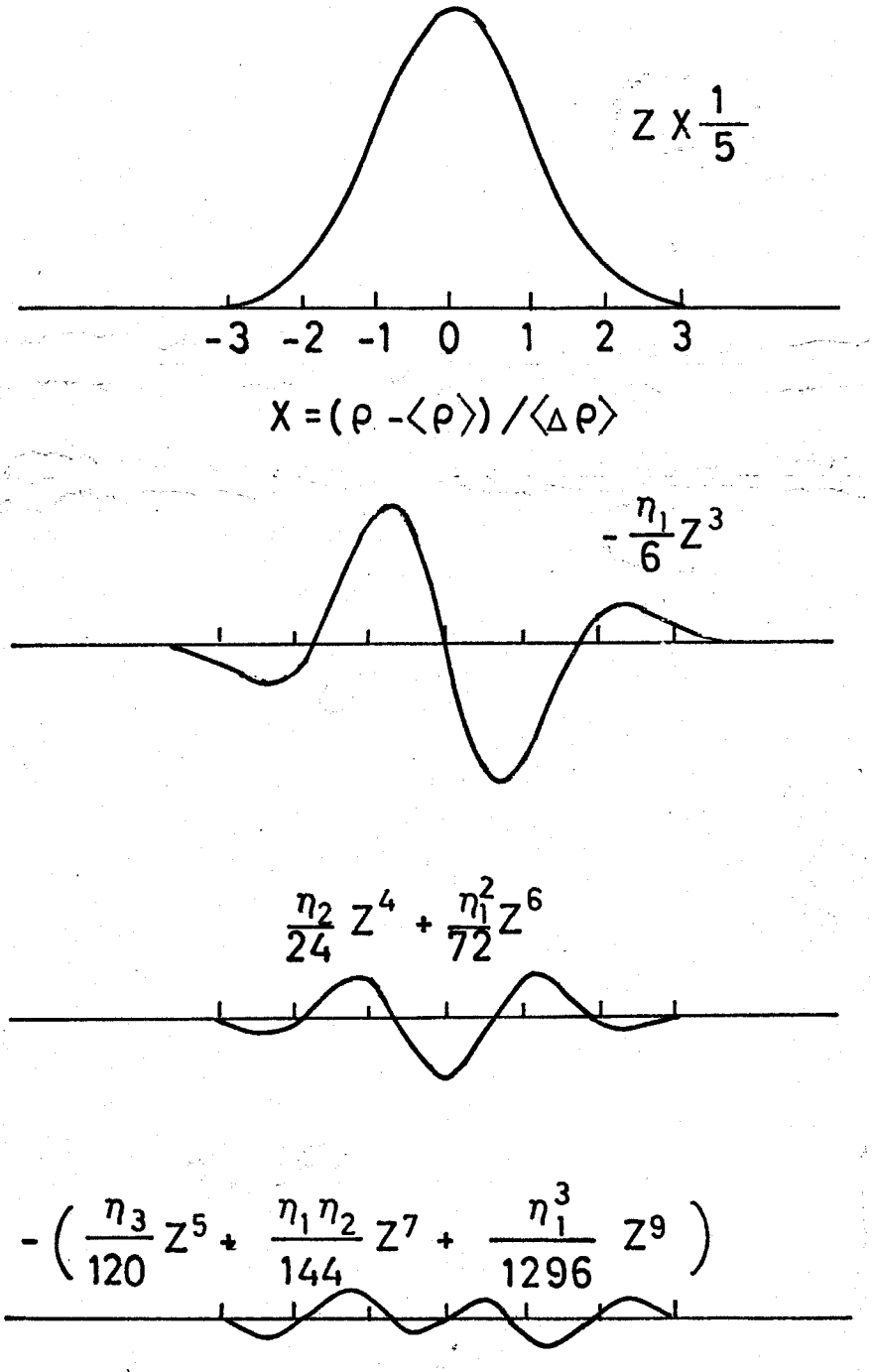


図3－6　Edgeworth の漸近形における補正項の大きさ
（$M_1 = M_2$ の場合）　（r^{-2} pot.）

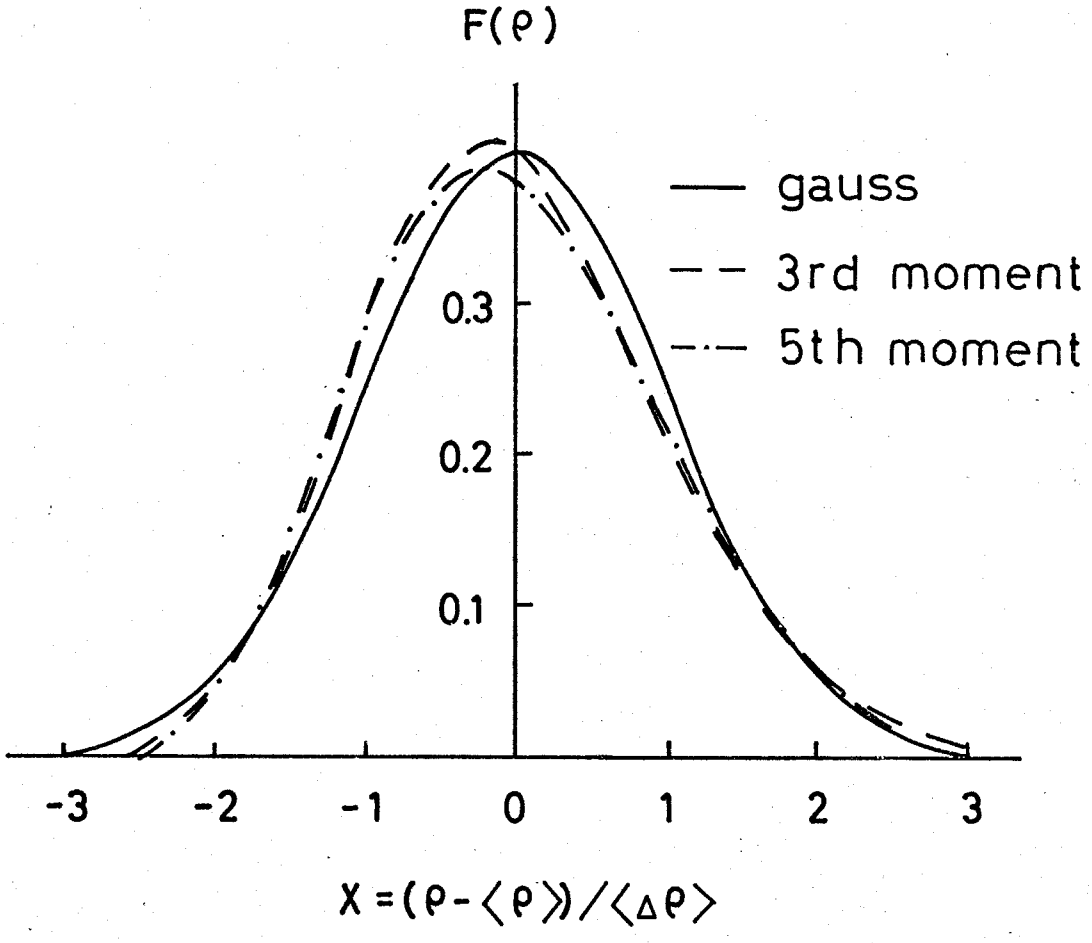


図 3 - 7　Edgeworth の漸近形を用いた飛程分布の合成
($M_1 = M_2$ の場合)　(r^{-2} pot.)

3.3.2 実験結果との対応

前項でも述べたように、一般のポテンシャルを仮定して、射影飛程分布の高次モーメントを求めるためには、高次の微分方程式を数値的に解く必要があり、実際上困難である。

本項では、Sigmund らによつて、r^{-2} ポテンシャルが仮定でき、かつ軌道電子によるエネルギー損失が、無視できる場合について解かれた射影飛程分布の3次のモーメントを用いて、ガウス分布を補正し、実験結果と比較することを試みる。

Sigmund らの方法は、3.2.3 で示した方法の拡張であり、積分方程式の厳密解となつている。(151) 結果を表 3-4 に示す。

M_1/M_2	$\langle\Delta\rho_p^2\rangle/\langle\rho_p\rangle^2$	$\langle\Delta\rho_p^3\rangle/\langle\rho_p\rangle^3$	η_1
1/10	1.684	0.345	0.16
1/4	0.710	0.221	0.37
1/2	0.409	0.135	0.52
1	0.275	0.079	0.55
2	0.195	0.043	0.50
4	0.125	0.021	0.48
10	0.058	0.007	

表 3-4 射影飛程分布の3次モーメント

$\langle\Delta\rho_p^3\rangle = \langle(\rho_p - \langle\rho_p\rangle)^3\rangle$, $\eta_1 = \langle\Delta\rho_p^3\rangle / \langle\Delta\rho_p^2\rangle^{3/2}$

同表より、射影飛程分布の補正項は $M_1 = M_2$ の付近で最大となることがわかる。射影飛程分布を求めるためには、式 (3.58) の Edgeworth の漸近形の各係数に射影飛程分布に関する量を代入すればよい。

また、前項の結果より、ガウス分布からのずれは、3次モーメントの寄与が支配的であることが、明らかとなったから、ここでは以下、3次のモーメントによる射影飛程分布のずれについて、定量的な検討を行なう。

すなわち、実験結果との対応を考え、基礎となるガウス分布の平均値および分散としては、Thomas-Fermiポテンシャルを用い、かつ軌道電子によるエネルギー損失を考慮して計算された値を用いる。(33) 一方、補正係数η_1としては、表3-4の値を用いる。Thomas-Fermiポテンシャルを用い、かつ電子阻止能を考慮した場合と、r^{-2}ポテンシャルを用いて、電子阻止能を無視した場合とでは、η_1の値は、若干変化すると考えられるが、補正項は、1次微小項とみなせるので、少くとも、電子阻止能が無視できるエネルギー領域においては、このような近似を行なっても、妥当な結果が得られると予想される。

ただし、電子阻止能が支配的となるエネルギー領域に関しては、必ずしも妥当な仮定といえないので、以下の議論は、核阻止能が支配的となるエネルギー領域について主に行なう。Si中にPイオンを打込んだ場合には、図2-7より明らかなように、核阻止能が支配的となるエネルギーは、250keV以下である。

Si基板中のPイオン分布を実験値(154)と比較した一例が、図3-8である。同図の破線がLSS理論から求まるガウス分布であり、3次のモーメントを考慮して補正した結果を実線で示してある。

同図より、最大イオン濃度を与える深さは、3次のモーメントを用いて補正することにより、実験値と良く一致することがわかる。最大イオン濃度を与える位置R_{max}は式(3.58)を微分することにより求まり、Si中のPイオンに対しては次式で与えられる。

$$R_{max} = \langle R_p \rangle - 0.24 \sqrt{\langle \Delta R_p^2 \rangle} \qquad (3.59)$$

式(3.59)を実験値[52),(154),(155)]と比較した結果を図3-9に示す。同図より、実験的に求まる最大イオン濃度は、ガウス分布を仮定した場合の平均射影飛程よりも約10%小さいが、飛程の3次モーメントを用いて補正した式(3.59)を用いると良く一致することがわかる。

しかしながら、高次モーメントを考慮しても、分布の尾の部分の形状変化はそれほど顕著ではなく、図3-10に示すように、指数関数的に深く伸びる分布の尾は、飛程の高次のモーメントでは説明できないことがわかつた。すなわち、実験的に求まる分布の尾は、異常拡散あるいは、チャンネリングが効果に起因するものと考えることができる。

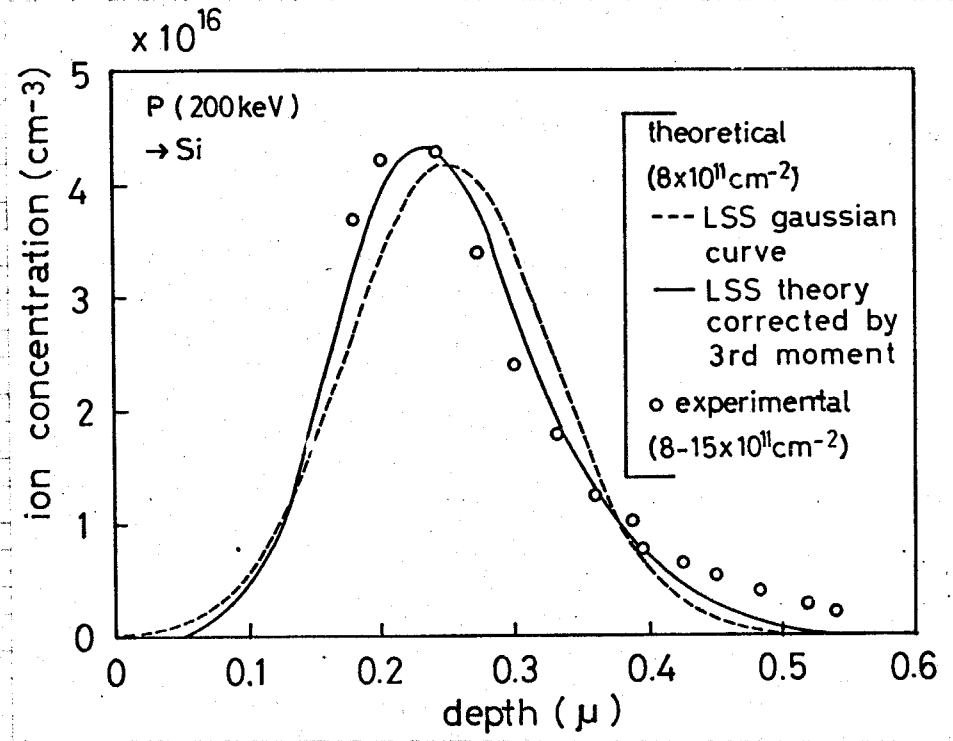


図3-8 Si中のPイオン濃度分布の理論値と実験値との比較。
実験結果はMolineによる[154]。(T-F pot. + r^{-2} pot.)

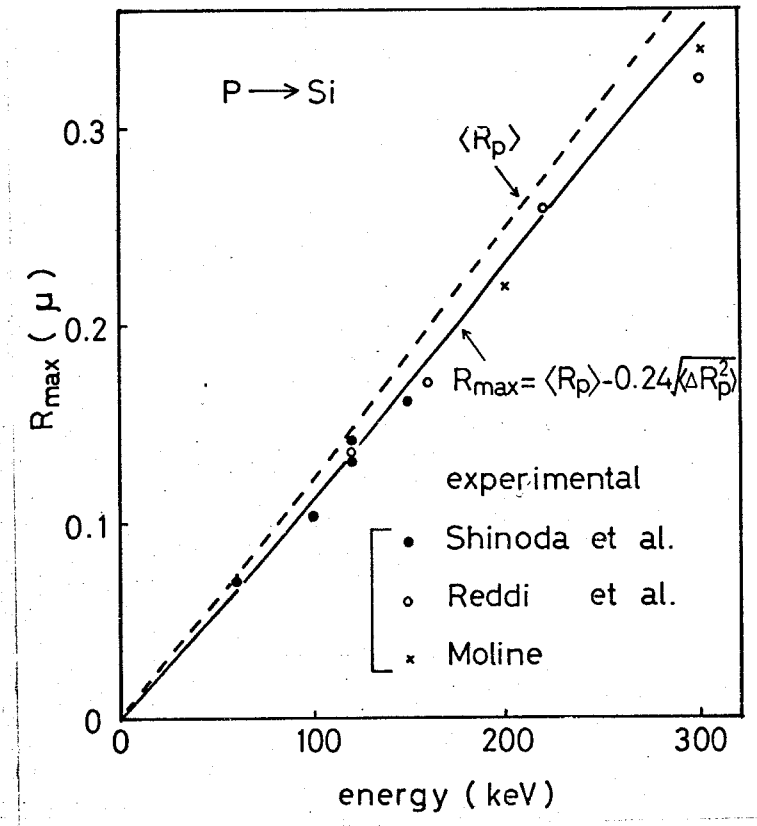


図3-9 Si中のPイオン濃度最大点と打ち込みエネルギーとの関係。
(T-F pot. + r^{-2} pot.)

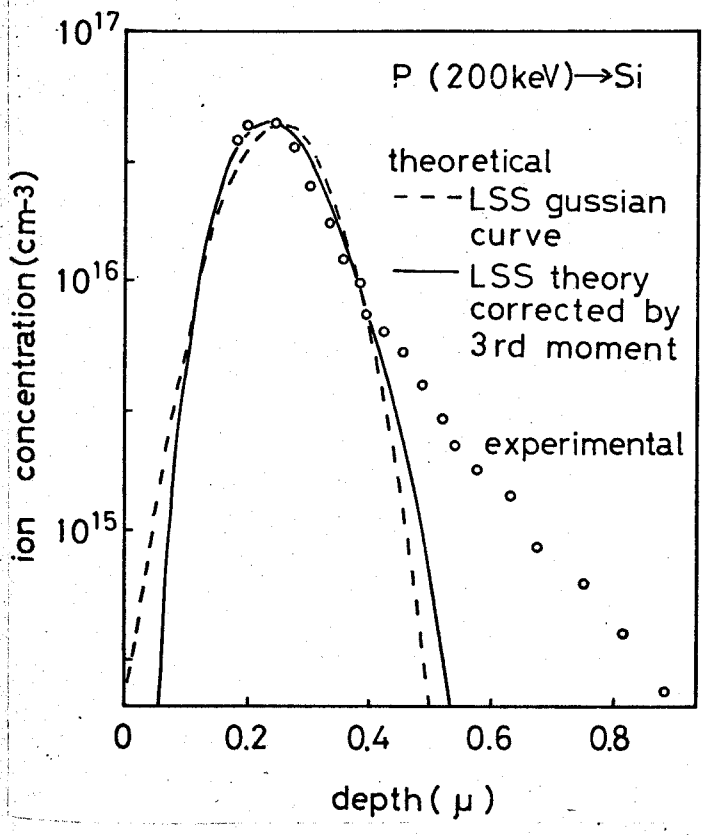


図3-10 Si中のPイオンの尾に関する理論値と実験値との比較。実験結果はMoline[154]による。
(T-F pot. + r^{-2} pot.)

3.4 本章のまとめ

本章では、Si, $GaAs$ などの単一の物質からなる基板中のイオンの飛程分布、および、射影飛程分布を、LSS理論を用いて検討し、以下のことを明らかにした。

(1) 飛程および射影飛程分布を求める場合に、通常用いられている1階微分方程式の解の精度を検討するため、基礎方程式の厳密解が求まる簡単なポテンシャルの場合について、厳密解と1階微分方程式の解との比較を行なった。

その結果、飛程分布に関しては、1階微分方程式を用いても、8.7%以内の誤差しか含まれないが、射影飛程分布の分散は、入射イオンが重い場合には70%以上の誤差を含むこと、また横方向拡がりは、入射イオンの質量が基板原子の質量とほぼ等しい場合に、約28%の誤差を含むことを明らかにし、射影飛程分布に関しては、中1近似としても1階微分方程式の解を用いることができないことを示した。

(2) つぎに、2階微分方程式を用いて、解を求めることを試み、2階微分方程式を厳密に解くと、積分定数の1つを数学的に決めることが難しく、数値解析を行なった場合には、解が発散する可能性が強いことを示した。

さらに、簡単な境界条件で安定な解を得る近似解析法を用いた場合の解の精度を厳密解と比較して検討した。その結果、2階微分方程式を近似的に解いた場合には、飛程分布の誤差は1.4%以内、射影飛程分布の誤差は平均値で、0.7%以内、標準偏差で3.1%以内、横方向拡がりで5.4%以内となり、工学的応用を考える場合には、2階

微分方程式の解を近似的に求める方法で十分であることを，解析的に示した。

(3) 従来，あまり問題にされていなかった、イオン分布のガウス分布からのずれに関して検討を行ない、最大イオン濃度に関する理論値と実験値の食い違いが、射影飛程の高次のモーメントを考慮することにより補正できる場合のあることを示した。

つぎに、Si基板中のPイオン濃度が、最大となる位置を与える式を導き、実験結果と良く一致することを明らかにした。

また、Si基板中に打込まれたPイオン分布の指数的に減少する尾は、飛程の高次のモーメントによっては説明できないことを明らかにした。

第4章　打込みイオンのエネルギー分布に基づく飛程分布の理論解析

前章では、打込みの対象となる基板が、SiとかGaAsのように単一の物質から構成されている場合について、飛程分布および射影飛程分布を求めた。しかしながら、イオン注入法の半導体工学への応用が進むにしたがい、この様な単一基板へのイオン注入だけではなく、半導体表面に酸化膜などの付いた多層構造基板へイオン注入する必要が生じてきた。

多層構造基板へのイオン注入を必要とする一例として、MOSFETのゲート閾値電圧制御のための注入があげられる。これは、ゲート酸化膜の下に、低濃度の不純物を低エネルギーで注入し、閾値電圧を再現性良く制御しようとする試みであり、この場合、ゲート酸化膜を通して半導体基板にイオン注入を行なう必要がある。[30], [35], [37], [157], [158]

このほか、MOSFETの高周波特性を改善するために、ゲートをマスクとしてイオン注入を行い、ソース、ドレインを自己整合で形成する場合には、通常パッシベーションのための酸化膜を通してイオン注入が行なわれる。[31], [157], [158]

このような多層構造基板中のイオンの飛程分布は、単純なガウス分布では、近似することができず、前章で解析したLSS理論を用いては求めることができない。

本章では、多層構造基板中のイオンの飛程分布を求める一つの方法として、基板中のイオンのエネルギー分布に基づいてイオンの飛程分布を求める方法について検討を行なう。ただし、この方法で得られる分布は、イオンの散乱角を考慮に入れてないので、イオンの進む方向に沿って測った飛程分布であり、実験的に求まる射影飛程分布とは異なっている。したがって、本章の解析は、飛程分布の形状と、射影飛程分布の形状が、ほぼ相似形であ

り，スケーリングにより，飛程分布から射影飛程分布を求めることができる場合，すなわち，図3-2より明らかなように，入射イオン質量が，基板原子質量よりも，3倍以上重い場合に限定するが，次章で，多層構造基板中のイオン分布を求める場合には，本解析法の結果の物理的解釈に基づいて，軽いイオンの射影飛程分布を求める方法についても，述べる。

4.1 基板中におけるイオンのエネルギー分布の導出

本節では、基板中のイオンのエネルギー分布を表面から、微少距離δRごとに計算する方法について検討を行なう。

4.1.1 解析の仮定

本章の解析に用いられる仮定を以下に示す。

仮定

(1) イオンは、基板原子との二体衝突を繰返してエネルギーを失なう。

(2) イオンと基板原子との、個々の衝突の間には相関がないとする。すなわち、イオンは非晶質基板、あるいは、ディチャンネリング状態で結晶基板に注入されるとする。

(3) 軌道電子に与えるエネルギーと、基板原子核に与えるエネルギーとは独立に考慮できる。

(4) 電子との衝突によるエネルギー損失は、空間的に平均化して考慮できる。

(5) 基板原子の束縛エネルギーは無視する。

(6) 核から十分離れた領域を通過したイオンのエネルギー損失は、空間的に平均化して考慮できる。

ここで、仮定(1)～(5)は、章3の解析に用いた仮定(1)～(5)と同一のものである。また仮定(6)は、クーロンポテンシャルに特有な遠距離の相互作用を平均化し、解析を簡単にするために導入された仮定である。

軌道電子の遮蔽効果を表わす関数として，Thomas-Fermi関数を用いた場合には，図2-3に示すように，イオンと基板原子核との距離が離れるにしたがって，遮蔽効果が顕著になり，核に与えるエネルギーは，クーロンポテンシャルの場合よりも，急激に減少するから，基板中の平均原子間距離以上離れたイオンとの相互作用について，この仮定を適用することは妥当と考えられる。

4.1.2 微少距離進んだ後のイオンのエネルギー分布

本項では、一定エネルギーEを持つイオンが基板中を微少距離δR進んだ後のエネルギー分布F(E', E)を求める。解析は仮定(3)に基づいて、核に与えるエネルギーと、軌道電子に与えるエネルギーとに分けて行ない、まず核に与えるエネルギーについて考察を行なう。

基板中をδR進んだ後のイオンのエネルギー分布を求めるには、基板中に、イオンの入射方向に垂直な厚さδRの仮想的な薄層を考え、この薄層通過後のイオンのエネルギー分布を求めればよい。

いま、単一の元素からなる基板を考え、薄層の厚みδRを十分薄くとると、入射方向から見て基板原子が互に重なり合う確率は十分小さくなり、図4-1に示すように、厚さδRの薄層中に3次元的に分布している原子を、同一平面内に等間隔で並べ換えることが出来る。

この様に等間隔に並べ換えることは、イオンの入射位置と基板原子位置という2つのランダム要素を、解析の簡単のために、イオンの入射位置のランダム性で代表させたことに相当し、これによって、物理現象を誤って解釈することはない。

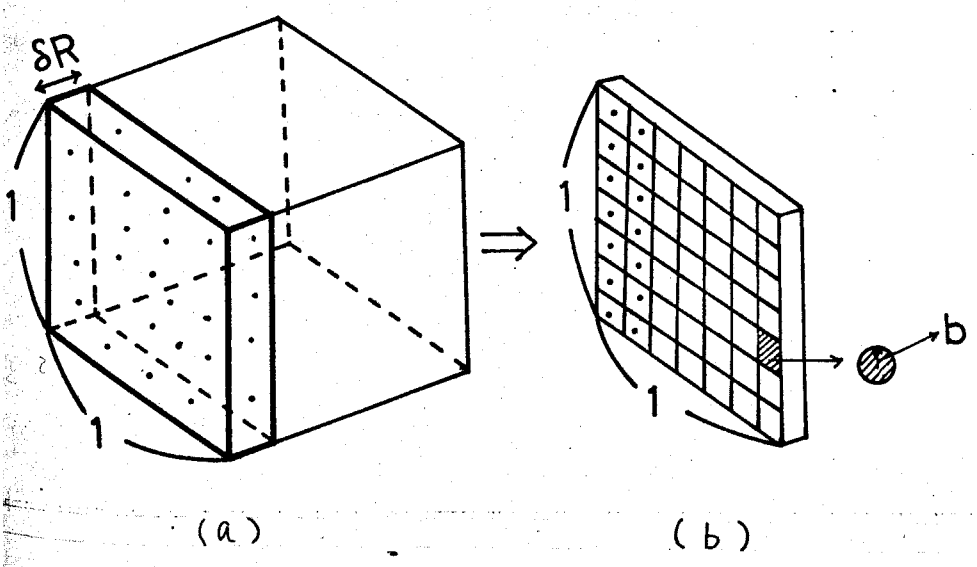


図4-1 個々の基板原子を取り囲む領域の半径 b の導出。

図4－1は、核阻止能$S_n(E)$を求めるために用いた図2－2と同一のものであり、したがって、各々の原子を取り囲む領域の半径bに対して、式(2.3)と同様に次式が成立つ。

$$\boxed{\pi b^2 N \delta R = 1} \qquad (4.1)$$

核阻止能$S_n(E)$を求める場合には、厚さδRの薄層通過後のイオンの平均エネルギーを式(2.4)を用いて求めた。一方、本解析法の場合には、薄層通過後のイオンのエネルギー分布を求める必要があるから、式(2.4)のような平均化を行なうことはできない。しかも、この場合には、全衝突断面積が無限大となり、入射エネルギーEが低くなると、遠距離にある基板原子の影響も無視できなくなるから、有限のδRについて議論を行なう場合には、衝突径数lが最も小さい基板原子(最近接原子)に与えるエネルギーばかりでなく、その周囲の原子に与えるエネルギーについても、すべて考慮する必要がある。

このように、全衝突断面積が無限大となる場合には、エネルギー授受の関係が複雑になり、薄層通過後のイオンのエネルギー分布を解析的に厳密に求めることは難しい。また図4－1(b)について、厳密に求まったと仮定しても、その分布は必ずしも図4－1(a)で示される実際の基板を通過した場合の厳密なエネルギー分布ではない。したがって、以下の解析は、図4－2に示す方法で薄層通過後のエネルギー分布を近似的に求める。

まず、図4－2(a)は図4－1(b)で表わされる薄層を通過したイオンのエネルギー授受の関係を示したものであり、イオンA_1は、基板原子BとB_1にそれぞれ、同図の縦軸で表わされるエネルギーT_nを与え、また、B_2など他の基板原子にも若干のエネルギーを与えて薄層を通過し、通過後にエネルギーがE′となる。同様に、イオンA_2は通過後のエネルギーが

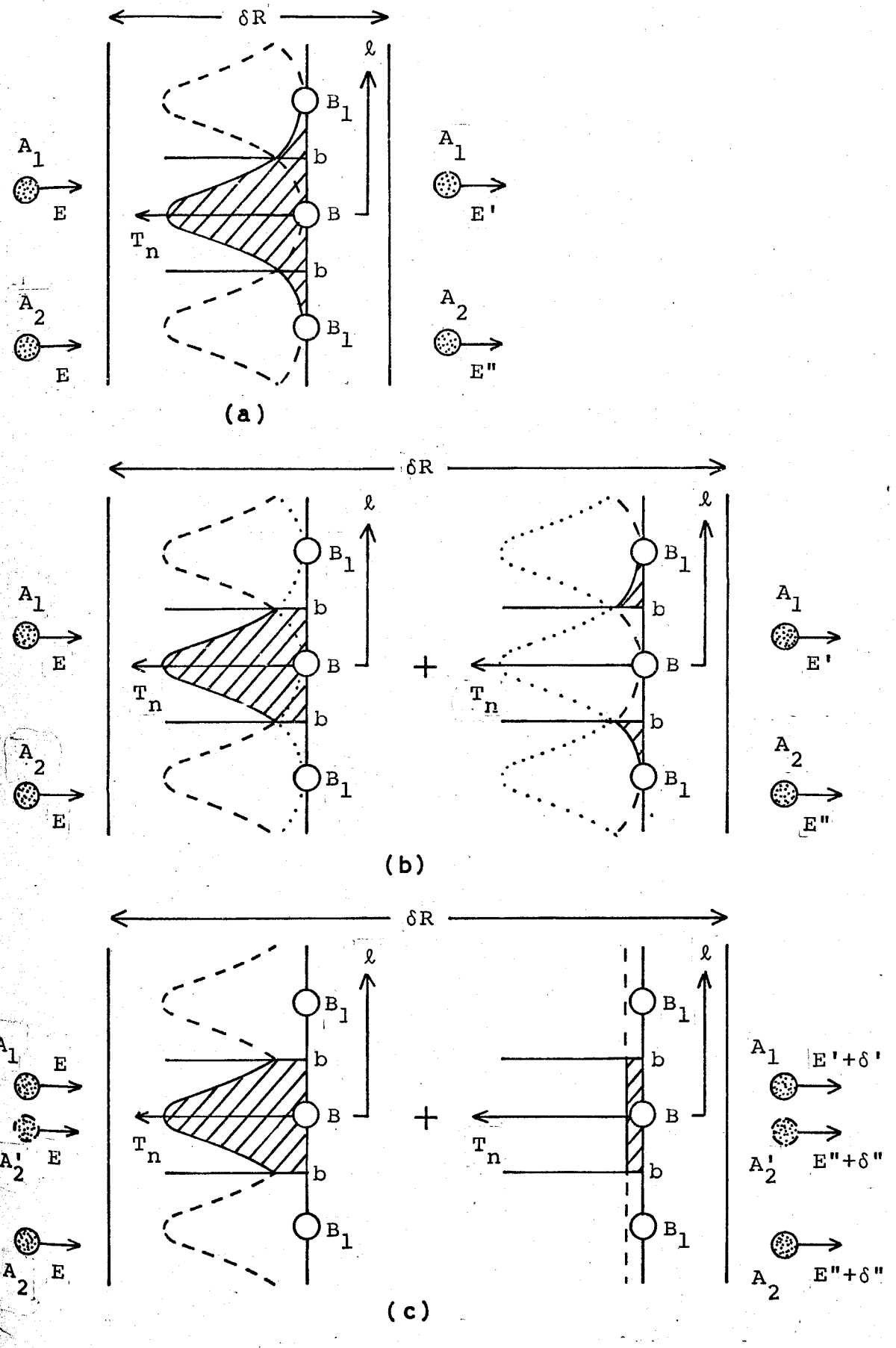


図4-2 薄層通過時のイオンのエネルギー損失の導出

E″となる。同図(b)は、基板原子に与えるエネルギーを、最近接原子に与えるエネルギーと、周囲原子に与えるエネルギーとに分解したものである。

つぎに、同図(c)は、同図(b)で分解したエネルギーのうち、周囲原子に与えるエネルギーを仮定(6)にしたがって平均化したものである。基板の周期性から原子Bが、半径bの領域の外側に及ぼしているポテンシャルと、Bの周囲にある原子が、半径bの領域内に及ぼしているポテンシャルとは等しいから、周囲原子による平均エネルギー損失$\langle T_n \rangle_S$は次式で与えられる。

$$\langle T_n \rangle_S = \frac{1}{\pi b^2} \int_b^\infty T_n \, 2\pi l \, dl \qquad (4.2)$$

同図(c)の場合には、薄層通過後の各々のイオンのエネルギーは、実際に得られる同図(a)の場合のエネルギーと若干異なる。しかしながら、全体としての平均値は一致しているから、半径bの領域の外側に及ぼすポテンシャルの影響が小さければ、このような近似的な解法によっても、SR進んだ後のイオンのエネルギー分布は、十分正確に表現できると考えられる。

また、基板原子の周期性から、同図(c)のイオンA_2とA'_2とは、全く同一のポテンシャルを経験することになるから、以下の解析は、すべてのイオンが原子Bの周囲の半径bの領域に入射すると考えて行なうことができる。

すなわち、図4-2より基板中をSR進んだ後のイオンのエネルギー分布は、基板原子Bの回りの半径bの円領域内に一様に入射したイオンの衝突後のエネルギー分布を求め、その分布を$\langle T_n \rangle_S$だけ補正することにより求められることがわかる。以下，仮定(1)に従って，イオンと基板原子との二体衝突を考え，衝突後のイオンのエネルギー分布を求める。

まず、イオンA（原子番号Z_1，質量M_1）と基板原子核B(Z_2, M_2）との衝突を、図4-3のように考える。この場合，イオンAは，

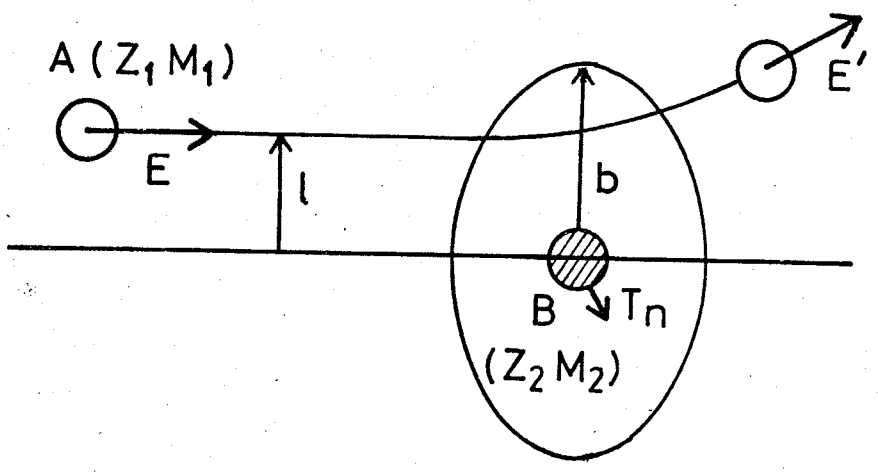


図4-3 入射イオンAと基板原子核Bとの衝突。

基板原子Bの周りの半径bの領域に一様に入射すると考えることができるから、lとl+dlの間の衝突径数で入射する確率 $F(l)\,dl$ は、次式で与えられる。

$$F(l)\,dl = 2\pi l\,dl / \pi b^2 \qquad (4.3)$$

したがって、この関数をエネルギーで表現すれば、衝突後のイオンのエネルギー分布を求めることができる。イオンAの入射エネルギーをE，衝突後のエネルギーをE'，基板原子核Bの得るエネルギーを T_n $(=E-E')$ とすると，微分断面積に関する式 (2.8)，(2.9) より次式が得られる。*

$$2\pi l\,dl = -\pi a^2 \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \qquad (4.4)$$

$$l^2 = a^2 \int_{C_E E\sqrt{\frac{T_n}{\delta E}}}^{C_E E} \frac{f(x)}{x^2}\,dx \qquad (4.5)$$

---

* 式 (4.4) の文字の説明は 51 ページにある。

式（4.4）を式（4.3）に代入し、さらに、式（4.6）で定義する衝突後のイオンのエネルギーの規格化値ξで、このt$^{1/2}$を置き換えると、衝突後のイオンのエネルギー分布として、式（4.7）を得る。

$$\xi = 1 - (E - E')/\gamma E = 1 - t/C_E^2 E^2 \qquad (4.6)$$

$$F(\xi)\,d\xi = \frac{a^2}{2C_E E b^2} f(C_E E\sqrt{1-\xi})\frac{d\xi}{(1-\xi)^{3/2}} \qquad (4.7)$$

上式は、式（4.3）より明らかなように次式の規格化条件を満たす。

$$\int_0^{\xi_0} F(\xi)\,d\xi = 1 \qquad \xi_0 = [\xi]_{\ell=b} \qquad (4.8)$$

式（4.7）が図4-2（C）のモデルで、最近接原子との相互作用を考慮した場合に得られる、薄層通過後のイオンのエネルギー分布である。式（4.7）の概念図を図4-4に示す。

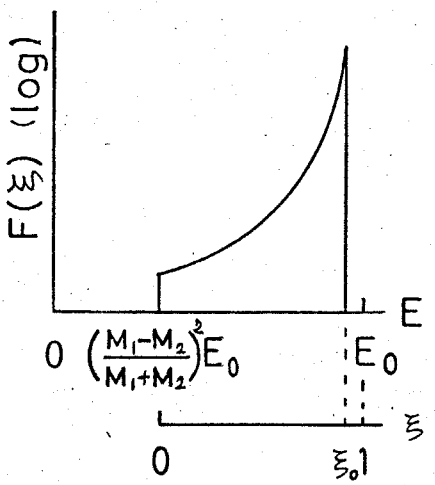


図4-4
一定エネルギーを持つイオンの薄層を1回通過した後のエネルギー分布

つぎに薄層を通過中のイオンが周囲原子核に与えるエネルギー$\langle T_n \rangle_{S1}$、および、仮定（3）で分離した軌道電子に与えるエネルギー$\langle T_e \rangle$に

ついて考察を行なう。

これらのエネルギーは、仮定(4)、(5)により、ともに、衝突径数に依存せず、入射エネルギーのみの関数として表わされる。したがって、薄層を通過したすべてのイオンは、$\langle T_n \rangle_S + \langle T_e \rangle$ のエネルギー損失を一様に受けることになり、これらを考慮した場合の分布は、図4-4で示された分布を、$\langle T_n \rangle_S + \langle T_e \rangle$ だけ低エネルギー側に平行移動した分布となる。すなわち、この分布は式(4.6)で定義したηを次式で定義しなおすことにより求めることができる。

$$\eta = 1 - \left[E - \left\{E' + \langle T_n(E) \rangle_S + \langle T_e(E) \rangle\right\}\right] / \delta E \qquad (4.9)$$

ここで、$\langle T_n \rangle_S$ は式(4.2)により与えられ、また、$\langle T_e \rangle$ は式(2.15)より、電子阻止能 $S_e(E)$ を用いて次式で与えられる。

$$\langle T_e \rangle = S_e(E) N \delta R = S_e(E) / \pi b^2 \qquad (4.10)$$

以上の解析により、エネルギーEで入射したイオンが基板中を、微少距離δR進んだ後の分布が求まった。この解析法によると、入射イオンは必ず $\langle T_n \rangle_S + \langle T_e \rangle$ 以上のエネルギー損失を受けることになり、Eが十分小さい場合には、通過後のエネルギーが負となる確率が生ずる。したがって、この負になる確率を、そのイオンの薄層内での静止確率と考えて、飛程分布を求めた。

また、基板原子核および電子に与えるエネルギーは、すべて、入射時のエネルギーに基づいて計算し、薄層内を通過中に、イオンのエネルギーが減少することは考慮されていない。したがって、薄層の厚さδRが大き過ぎる場合には、本解析法は正しい結果を与えない。妥当な飛程分布を与えるδRの値は次節で検討する。

4.1.3 多重衝突後のイオンのエネルギー分布

前項の解析においては、イオンの入射エネルギーは、一定値Eと仮定されていた。したがって、前項で求めたエネルギー分布は、基板表面からδR進んだ後のイオンのエネルギー分布を表わしていることになり、基板中でイオンが衝突を繰返した後の分布ではない。基板中で衝突を繰り返した後のイオンのエネルギー分布は、衝突前のイオンのエネルギーが統計的に広がっていることを考慮して求める必要がある。

いま基板中を、mδR進んだイオンのエネルギー分布を$F_m(E)$とすると、$F_{m-1}(E)$および$F_m(E)$の間には次の関係が成立つ。

$$F_m(E') = \int_{E_\ell}^{E_u} F_{m-1}(E)\cdot F(E',E)\,dE \qquad (4.11)$$

ただし、$F_0(E)=\delta(E-E_0)$（δ：デルタ関数，E_0：打込みエネルギー）である。また，$F(E',E)$は式（4.7）をE'，Eで表わしたものである。積分の上限E_u，下限E_ℓは式（4.8）の上限および下限に対応しており、式（4.9）に$\eta=\eta_0$，$\eta=0$を代入することにより数値的に求めることができる。

式（4.11）のE'を順次変えながら、積分を行なうことにより、エネルギー分布関数$F_m(E)$が計算できる。したがって、基板中をmδR進んだ後のイオンのエネルギー分布は、$m=1$よりmまで式（4.11）を順次計算することにより求めることができる。

また，$(m-1)\delta R$とmδRの間で止まるイオン数は，$(m-1)\delta R$進んだ後に正のエネルギーを持つイオン数と、mδR進んだ後に正のエネルギーを持つイオン数の差で与えられるから、この差を，イオンの進んだ距離に対して目盛ることにより、基板中のイオンの飛程分布が求まる。基板中の

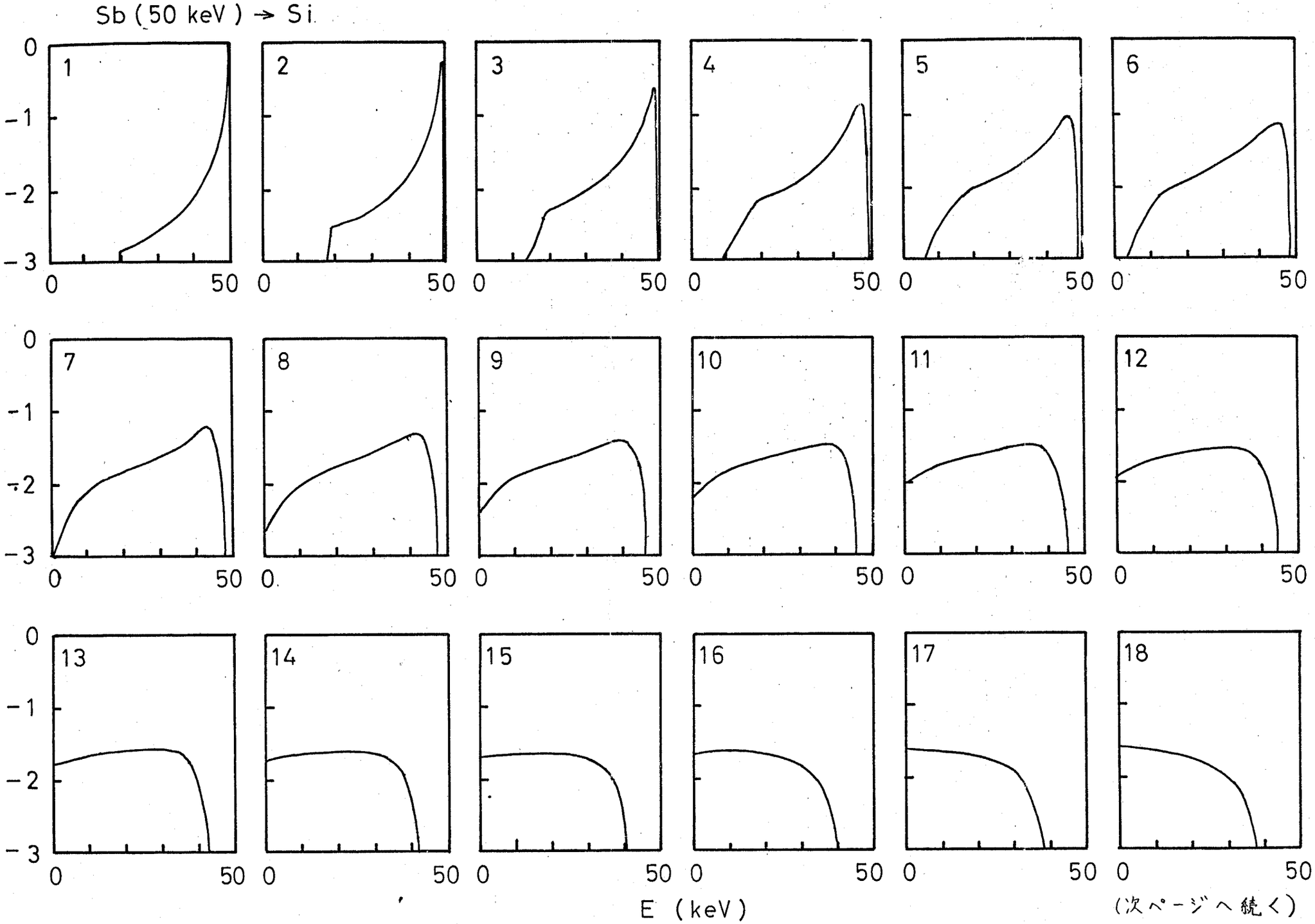
イオンのエネルギー分布および飛程分布を求める計算機プログラムを付録Bに示す。

一例として、Si基板中に50keVで打込まれたSbイオンのエネルギー分布を図4-5に示す。同図の計算は、原子核ポテンシャルとしてr^{-2}ポテンシャルを仮定し、軌道電子によるエネルギー損失は無視した。また、δRとしては13.6Å（Si基板中の5原子層に相当する）を仮定しており、同図にはδRごとのエネルギー分布の変化が示されている。

同図-1は、図4-4を具体的に計算したもので、一層通過後に最も低いエネルギーになるSbイオンは、Si原子と衝突径数0で衝突した場合である。式(4.9)に$t=0$を代入して、この値を求めると、約20keVとなり、同図に示すように20keVよりも低いエネルギーを持つSbイオンの存在確率は0となる。また、Sbイオンの平均飛程(270Å)に対応するエネルギー分布は、同図-20であり、平均飛程よりも深く進んだイオンについては、エネルギーが低くなるほど、存在確率が高いことを示している。

つぎに、本解析法で求まるイオンのエネルギー分布の平均値を、LSS理論から求まる平均エネルギーと比較して、本解析法の妥当性について検討を行なう。

LSS理論において、平均エネルギーを求める場合には、基板を連続体と見なして解析を行なうため、エネルギーのゆらぎが生じない。したがって、デルタ関数で与えられるエネルギー分布で入射したイオンの基板中におけるエネルギー分布は、やはりデルタ関数で与えられ、総てのイオンが、平均飛程の位置で止まることになる。いま、r^{-2}ポテンシャルを仮定し、かつ軌道電子によるエネルギー損失を無視した場合には、式（2.14）に示すように、基板の阻止能が一定値となるから、平均エネルギーは、表面から直線的に減少し、平均飛程において、0となる。



(次ページへ続く)

図 4-5(a)　Si 基板中の 50 keV Sb イオンのエネルギー分布 (I)　(r^{-2} pot.)

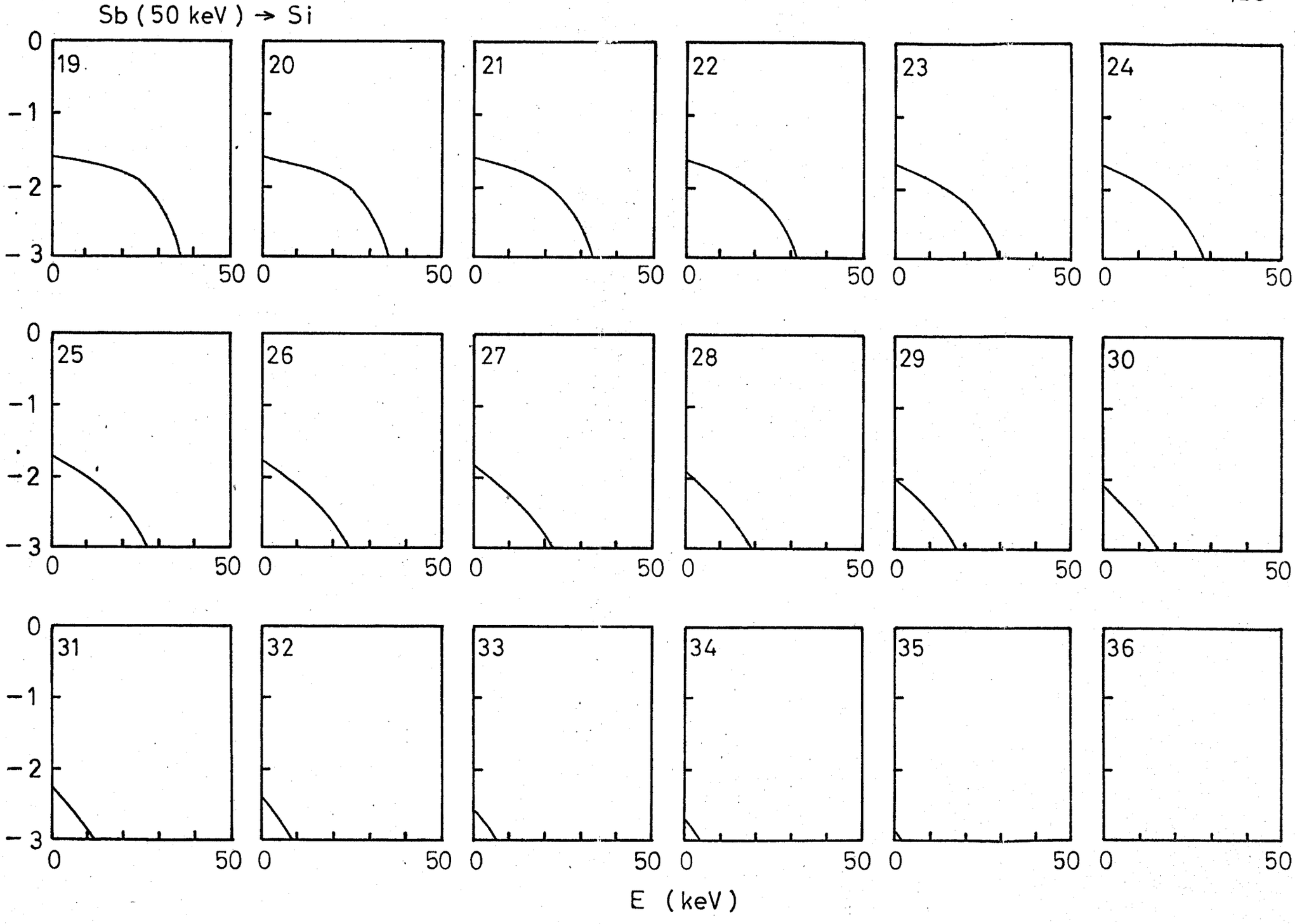


図 4-5 (b)　Si 基板中の 50 keV Sb イオンのエネルギー分布 (II)　　(r^{-2} pot.)

この仮定の下に計算した 50 keV Sb の Si 中の平均エネルギーを図 4－6 に示す。

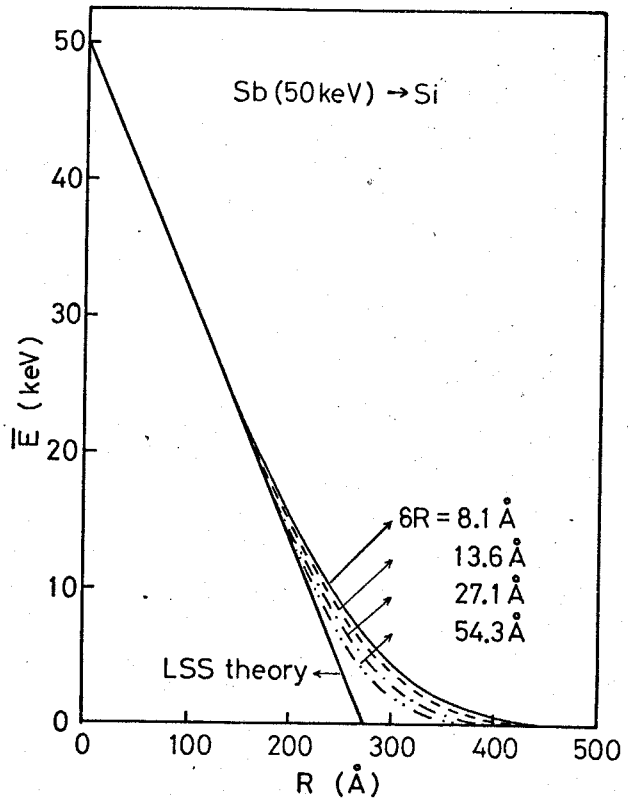


図 4－6
Si 基板中の 50 keV、Sb イオンの平均エネルギー。

同図には、本解析法を用いて求めた静止していないイオンの平均エネルギーが、δR をパラメターにして同時に示してある。同図より、本解析法による平均エネルギーは、大部分のイオンがまだ静止していない基板表面付近で、LSS 理論から求まる値と良く一致することが分る。このことより、本解析法は、平均エネルギーに関して妥当な結果を与えると結論できる。

また、平均エネルギーが低くなった場合に値がずれるのは、前述のように、LSS 理論では、平均エネルギーが 0 になる直前まで静止するイオンが無いのに対し、本解析法では、エネルギー分布の広がりを同時に考慮して、正のエネルギーを持つイオンについてだけ平均値を求めているためである。

4.2 単一元素基板中のイオン分布

本節では、前節で求めたイオンのエネルギー分布に基づいて、一種類の元素で構成されている基板中のイオンの飛程分布を計算する。ただし、本解析法で求まる分布は、すでに述べたようにイオンの進む方向に沿って測った飛程分布であり、実験的に求まる射影飛程分布とは異なっている。したがって、本章の解析は、両者の違いが少なく、簡単な補正により、飛程分布から射影飛程分布を求めることができる重いイオンを打込んだ場合について考察を行なう。

4.2.1 解析の妥当性に関する検討

本章で、考察の対象としている単一層基板中のイオンの飛程分布は、LSS理論を用いて計算することができる。したがって、本項では、LSS理論から求まる飛程分布と本解析法の結果とを比較して、本解析法の妥当性を明らかにする。

前節で求めたイオンのエネルギー分布から、イオンの飛程分布を求めるためには、イオンの静止条件について考察を行なう必要がある。この条件としてはイオンの持つエネルギーが、基板原子の束縛エネルギー程度になることがあげられるが、イオン注入法で用いられる打込みエネルギーは、通常、数十～数百keVであり、通常の結晶における原子の束縛エネルギー（約25eV）[159]に比べて十分大きく、束縛エネルギーを無視しても、飛程分布に関して大きな誤差は生じないと考えられる。（仮定 (5)）

したがって、本解析法では、厚さSRの仮想的な薄層を（n−1）回

通過した後に正のエネルギーを持つイオン数と、m回通過した後に正のエネルギーを持つイオン数の差が、(m-1)δRとmδRの間で止まるイオン数に等しいと仮定して、イオンの飛程分布を求める。

γ^{-2}ポテンシャルを用いて計算した50keV Sbの Si中における飛程分布を図 4-7 に示す。同図の計算はγ^{-2}ポテンシャルを仮定し、軌道電子によるエネルギー損失を無視して求めた。図中のパラメターδRは、それぞれSiの3, 5, 10, 20の原子層に対応している。また、同図には、比較のためLSS理論を用いて計算したガウス形の飛程分布が示されている。同図より、以下の結論が得られる。

(1) δRの値を大きくすると、平均飛程は変化しないが、飛程の分散が小さくなり、LSS理論から求まる分布からずれてくる。

(2) 表面付近の分布に関しては、δRの値を小さくとっても、LSS理論から求まるガウス分布とは一致しない。

LSS理論との比較を最大イオン濃度について行なった結果を図4-8に示す。同図より、δRが大きい場合には、飛程分布の分散が小さく、したがって、最大イオン濃度は、LSS理論から求まる値よりも、かなり大きいが、δRを小さくするにしたがって、最大イオン濃度はLSS理論から求まる値に漸近することが明らかとなる。

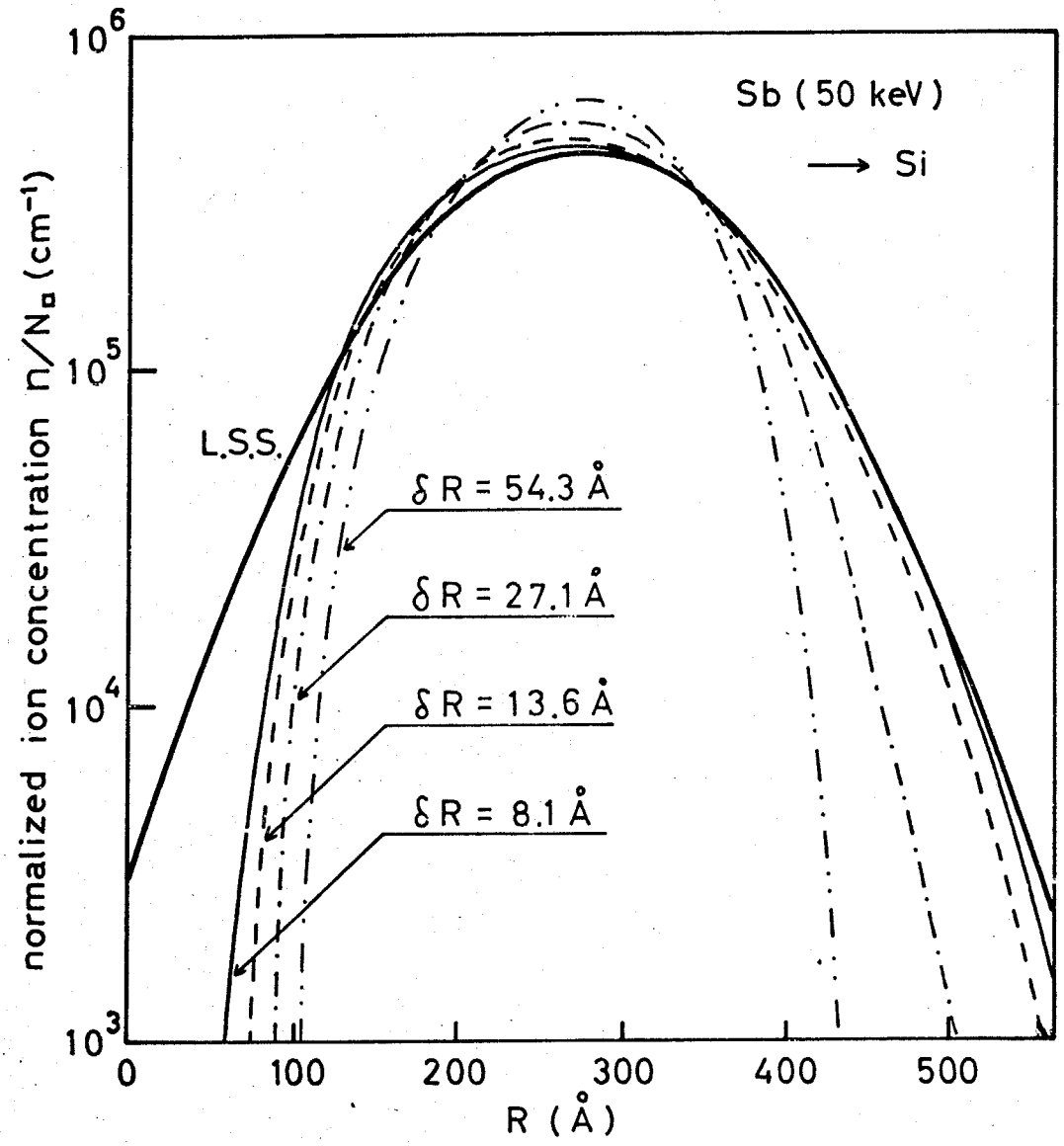


図4-7　Si 基板中 50 keV、Sb イオンの飛程分布の LSS 理論との比較。(r^{-2} pot.)

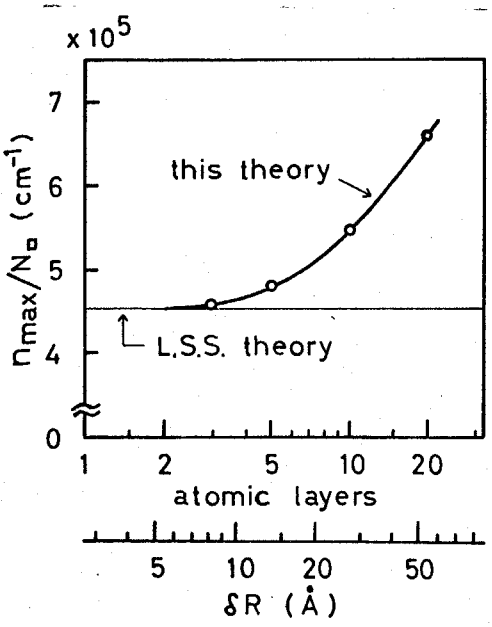


図4-8　δRによるSi中の50 keV Sbイオンの最大濃度の変化。
(r^{-2} pot.)

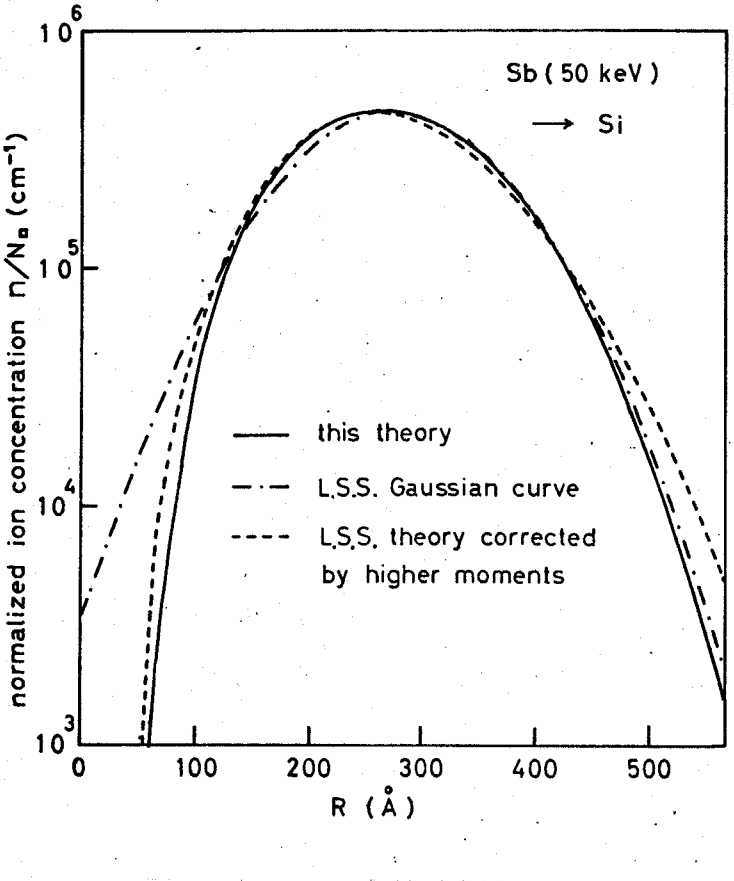


図4-9　高次モーメントを考慮したLSS理論と本解析法との比較。(50 keV, SbイオンをSiに注入した場合。)
(r^{-2} pot.)

つぎに、LSS理論において、飛程の高次のモーメントを考えることにより、本解析法で得られた表面付近のガウス分布からのずれが説明出来るかどうかについて検討を行なう。 r^{-2}ポテンシャルを仮定した場合、飛程の高次モーメントは式(3.57)で、またその時の分布関数は式(3.58)で与えられる。同式の第3補正項までを考慮して求めたSi基板中の150keV Sbイオンの分布を図4-9に示す。同時に示した本解析法の結果($\delta R = 8.1$ Å)と比較すると、表面付近の分布を含めて、全体に良く一致することがわかる。

このことより、入射イオンのエネルギー分布に基づく解析法は、基板中に想定した薄層の厚さδRを十分小さくとることにより、妥当な結果を与えると結論できる。また、δRの厚みは、薄ければ薄いほど、正確なエネルギー分布および飛程分布を与えると考えられるが、工学上有用な飛程分布を求めるためには、必ずしも基板の原子間距離にとる必要はなく、いくつかの原子層をまとめてδRと考えることができることがわかった。

図4-7、4-8より、計算例における最大イオン濃度付近の分布を議論する場合には、δRを5原子層に相当する距離(13.6 Å)より小さく選べば、工学上十分であると結論出来る。

このような、工学上十分な正確さをもつ飛程分布を与えるδRの値は、入射エネルギー、イオンおよび基板原子の質量などにより異なると考えられるが、平均飛程$\langle R \rangle$ずー応の目安を与えると考えることができる。つまり、妥当なδRは、定数と見なしてもよいCで、次式のように与えられるであろう。

$$\delta R = \langle R \rangle / C \qquad (4.12)$$

上に述べた結果よりSi中の50keV Sbの飛程分布を計算する場合には、Cの値を20以上に選ぶ必要がある。

式(4.12)の妥当性を検討するため、エネルギーを変えて計算した一例を表4-1に示す。同表は、r^{-2}ポテンシャルを仮定し、また、軌道電子によるエネルギー損失を考慮に入れて求めた50keVおよび、100keV Sbイオンの Si中の平均飛程および標準偏差*を示している。

エネルギー		100 keV	50 keV	50 keV
LSS理論	$\bar{R}$	503 Å	258 Å	258 Å
	$\overline{\Delta R}$	149 Å	79 Å	79 Å
本解析法	δR	13.6 Å	6.8 Å	13.6 Å
	C	37	38	19
	$\bar{R}'$	508 Å	255 Å	255 Å
	$\overline{\Delta R}'$	150 Å	77 Å	71 Å
$\bar{R}'/\bar{R}$		1.01	0.99	0.99
$\overline{\Delta R}'/\overline{\Delta R}$		1.01	0.97	0.90

表4-1 Si基板中の50 keVおよび100 keV、Sbイオンの平均飛程および、標準偏差。(r^{-2} pot.)

同表より、Cとして37～38を用いた場合には、LSS理論との食い違いは、$\langle R \rangle$, $\langle \Delta R \rangle$ とも3%以内であるが、50keVの場合の例に見る様に、Cとして19を用いた場合には、$\langle \Delta R \rangle$ がLSS理論より約10%小さくなることがわかる。このことより、打込みエネルギーが異なっている場合にも、同じCの値を用いて式(4.12)よりδRを求めることにより、妥当な飛程分布が得られるといえよう。

---

* 本解析法により求まるイオンの飛程分布は、完全なガウス分布ではないので、最大値の1/10の値を用いて、等価的な標準偏差を計算してある。

「 以上の検討より、入射イオンのエネルギー分布に基づく解析法は、式（4.12）のCの値を同一に選ぶことにより、入射エネルギーが異なっている場合でも、同程度の正確さで飛程分布が求まること、および、工学上十分正確な飛程分布を得るためには、Cの値を20以上に選ぶ必要のあることが結論された。

4.2.2 Thomas-Fermi ポテンシャルを用いた飛程分布の計算

前項では，解析が容易な r^{-2} ポテンシャルを用いて，単一層基板中のイオンの飛程分布を求め，本解析法の妥当性を示した。この結果に基づいて，本項では，実験結果を最も良く説明できると考えられているポテンシャルを用いて，飛程分布を求めることを試みる。すなわち，本項においては，原子核間のポテンシャルとして，Thomas-Fermi ポテンシャルを仮定し，かつ，軌道電子によるエネルギー損失をも考慮に入れて解析を行なう。

Thomas-Fermi ポテンシャルを仮定した場合のエネルギー分布は，基本式（4.7）の f に図 2-4 に示されている値を代入すればよい。また軌道電子によるエネルギー損失は，式（4.9），（4.10）を用いて解析に含めることができる。

50keV で Si 基板に打込まれた Ar イオンに関する計算例を図 4-10 および図 4-11 に示す。この場合 LSS 理論から求まる平均飛程は 640Å となるから，同図の計算は式（4.12）の C が 20 以上になるように，δR として 27.1Å を仮定した。

まず，図 4-10 は基板中各点におけるイオンのエネルギー分布を示している。同図のエネルギー分布は，108Å（4δR）ごとに示されており，平均飛程付近のエネルギー分布は同図 - 6 で与えられる。同図と r^{-2} ポテンシャルを仮定して求めた図 4-5 とを比較すると，2keV 以下のエネルギーにおいて，分布の形状がはっきり異なっており，Thomas-Fermi ポテンシャルを用いて計算した図 4-10 の場合には 2keV 以下のエネルギーを持つイオン数が急激に増加していることがわかる。

この違いは，Thomas-Fermi ポテンシャルの場合には，エネルギーが十分低くなると，図 2-5 に示すように核阻止能が小さくなるから，イオンは，低エネルギーを保ったまま，かなりの距離を進むことになり，その結果，低いエネルギーを持つイオンの存在確率が増加すると解釈できる。

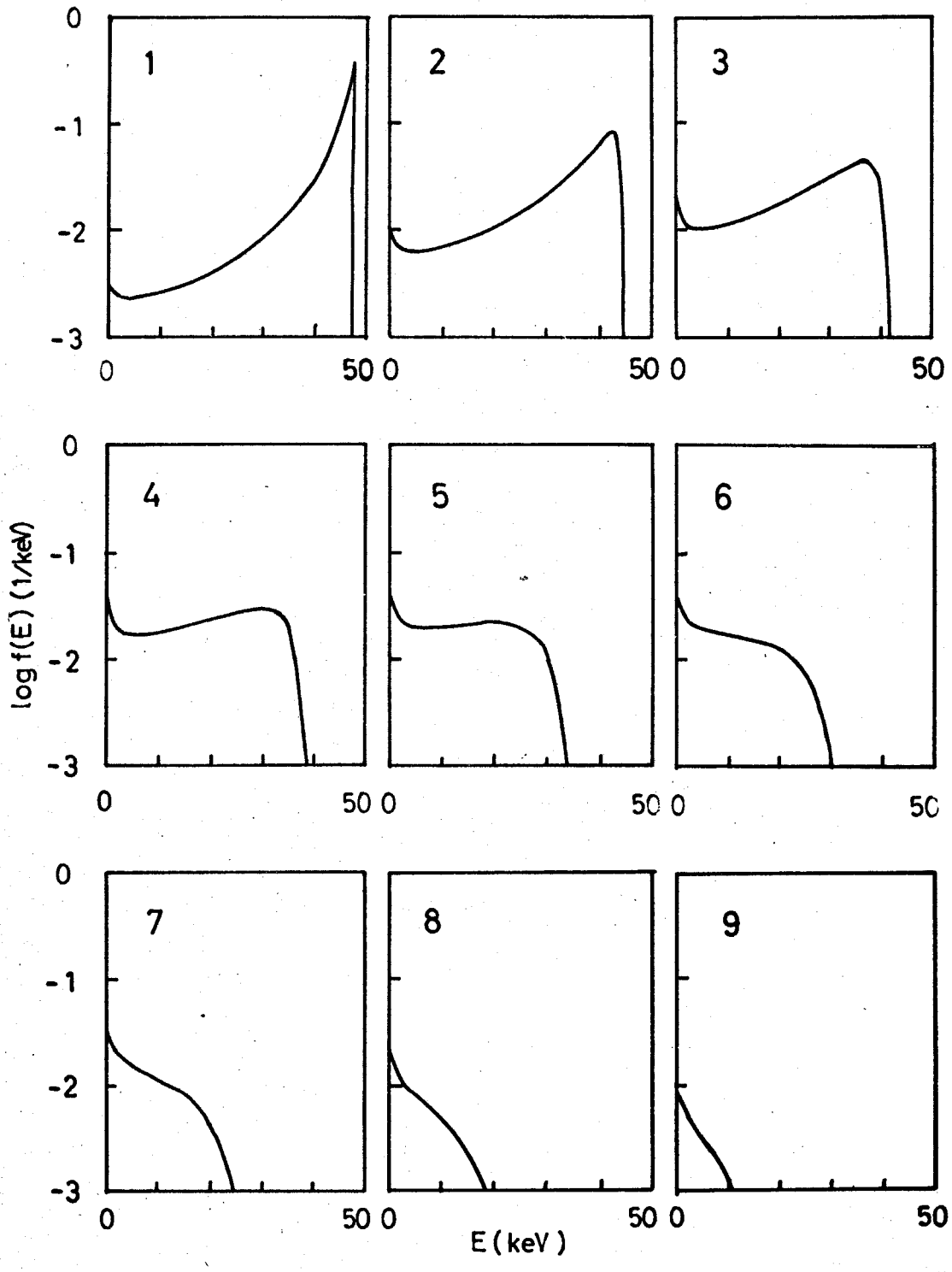


図 4-10　Thomas-Fermi ポテンシャルを用いた場合の基板中のイオンのエネルギー分布。(50 keV Ar → Si)
(T-F pot.)

このように、飛程分布の形状はともにガウス分布で近似できても、イオンのエネルギー分布は仮定するポテンシャルによって大きく異ることがわかる。このことからも、多層構造基板中のイオンの飛程分布を求める場合に、ガウス分布を単純に重ね合わせることは、物理的根拠がなく、基板中のイオンのエネルギー分布を知る必要のあることがわかる。

なお、Si基板中にArを打込んだ場合には、両者の質量が近いため、50keVのArは、1回の衝突で、最大48.4keVのエネルギーを失なうことになり、図4-5-1に表われているような、分布確率の急激な減少は、図4-10には表われていない。

つぎに、Arイオンの飛程分布を、図4-11に示す。

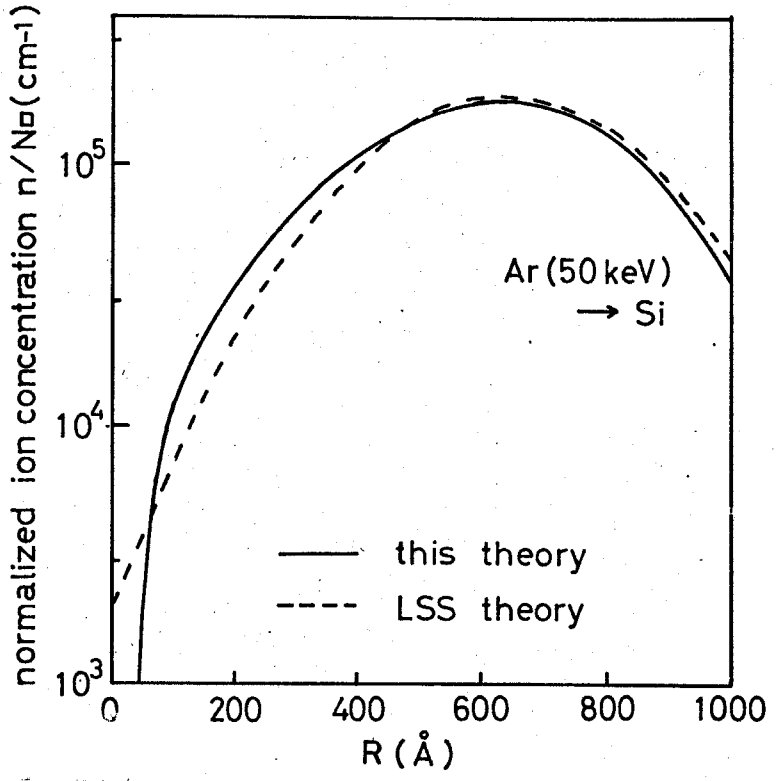


図4-11 Thomas-Fermi ポテンシャルを用いて計算された Si 基板中の 50 keV、Arイオンの飛程分布。(T-F pot.)

同図には、LSS理論でガウス分布を仮定して求めた飛程分布が比較のために示してある。同図より、低濃度の領域で、LSS理論との食い違いが、r^{-2}ポテンシャルの場合よりも大きくなっているが、平均飛程付近の分布に関してはC＝20程度でも、かなり精度の高い議論ができることがわかる。

このことより、Thomas-Fermiポテンシャルを用いた場合にも、同一のCの値を用いて式(4.12)を満たすようにSRを選ぶことにより、ほぼ妥当な飛程分布が得られると結論できよう。

なお、表面付近の分布の食い違いは、LSS理論において飛程の高次モーメントを考慮して、ガウス分布を補正することにより、より一致すると考えられる。

4.3 化合物基板中の飛程分布

本節では、イオンのエネルギー分布に基づいて、飛程分布を求める解析法を、2種類以上の元素からなる化合物基板に適用する方法について述べる。

基板はK種類の元素からなると仮定し、元素iの原子番号、質量、単位体積中の個数を、それぞれ、Z_{2i}, M_{2i}, N_i とする。本節においても、基板中に厚さδRの仮想的な薄層を考え、その薄層を通過するごとのイオンのエネルギー分布の変化を求めることを考える。

薄層を通過後のイオンのエネルギー分布を求めるためには、イオンと基板を構成している各々の元素との衝突を考えることが必要であるが、本節の解析においても、仮定（6）にしたがって、図4-2（c）に示すように、十分離れた基板原子に与えるエネルギー損失は平均化して取扱う。ただし、単一元素基板の場合には、基板原子の周期性から、イオンは常に一つの原子の回りの領域に入射すると考えて、考察できたのに対し、化合物基板の場合には、周期性の単位は一つの分子となるから、一つの分子の回りに入射するイオンのエネルギー分布を求める必要がある。

図4-1と同様な考えにしたがい、元素iの周囲領域の面積を半径b_iの円で表わすと、式（4.1）に対応して次式が得られる。

$$\pi \cdot \delta R \sum_i b_i^2 N_i = 1 \qquad (4.13)$$

つぎに、元素iの周囲領域の半径b_iと、元素jの周囲領域の半径b_jとの比を求める。この比は、単に幾何学的に決めるのではなく、元素iとjとの境界を通過したイオンが両元素に等しいエネルギーを与えるよう

に決めるのが最も妥当と考えられる。

元素 i, j の原子核に与えるエネルギーを、それぞれ T_{ni}, T_{nj} とすると、T_{ni}, T_{nj} は式（4.5）により衝突径数と関連づけられるから、同式で $T_n = T_{ni} = T_{nj}$ とおいて、左辺の比をとることにより、b_i^2 / b_j^2 が求まる。ただし、このようにして、一般のポテンシャルについて求めたこの比は、イオンのエネルギーの関数となり、取扱いに不便である。そこで本節の解析では、以下に示すように、r^{-2} ポテンシャルの場合について近似的に求め、エネルギーに依存しない量として取扱う。

式 (4.5) に $l = b_i$, $f(x) = \lambda_2 (= 0.326)$ を代入すると、

$$b_i^2 = \frac{a_i^2 \lambda_2}{C_{Ei} E} \left(\sqrt{\frac{\gamma_i E}{T_n}} - 1 \right) \qquad (4.14)$$

ここで、b_i は核から十分離れているから、$\gamma_i E \gg T_n$ と仮定することができ、したがって、b_i^2 / b_j^2 は次式に示すように、E, T_n に無関係な値となる。

$$\frac{b_i^2}{b_j^2} = \frac{a_i^2 \sqrt{\gamma_i}\, C_{Ej}}{a_j^2 \sqrt{\gamma_j}\, C_{Ei}} = \left(\frac{M_{2j}}{M_{2i}}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{Z_{2i}}{Z_{2j}}\right) \left(\frac{Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_{2j}^{\frac{2}{3}}}{Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_{2i}^{\frac{2}{3}}} \right)^{\frac{1}{2}} \qquad (4.15)$$

このように、r^{-2} ポテンシャルで、かつ、境界付近を通るイオンが基板原子に与えるエネルギーは十分小さいという仮定を用いることにより、それぞれの元素の占める領域の面積の比が、入射イオンのエネルギーに無関係に求まることがわかった。Thomas-Fermi ポテンシャルを用いた場合には、この比は、エネルギーの関数となり、式（4.15）とは若干異なると考えられるが、この比が多少変り、したがって、ある元素の占める面積が小さくなったとしても、その領域の外側に及ぼすポテンシャルの影響は、

別に平均化を行なって考慮に入れるので、結果には、大きな影響を及ぼさないと考えられる。

各々の元素の占める領域の面積は、式（4.13），（4.15）より計算できるから、次式によって与えられる，イオンが元素iの周囲領域に入射する確率 P_i が求まる。

$$P_i = \frac{\pi b_i^2 N_i}{\sum_i \pi b_i^2 N_i} \qquad (4.16)$$

つぎに、周囲原子によるエネルギー損失および、軌道電子によるエネルギー損失は、すべての元素からの寄与を平均化して考えれば良いから、以下のように求めることができる。

$$\langle T_n \rangle_S = \sum_{i=1}^{k} \frac{P_i}{\pi b_i^2} \int_{b_i}^{\infty} T_{ni}(\ell)\, 2\pi \ell\, d\ell$$

$$= \delta R \sum_{i=1}^{k} N_i \int_{b_i}^{\infty} T_{ni}(\ell)\, 2\pi \ell\, d\ell \qquad (4.17)$$

$$\langle T_e \rangle = \delta R \sum_{i=1}^{k} N_i S_{ei}(E) \qquad (4.18)$$

すなわち、厚さ δR の薄層を通過したイオンが、もし元素iの周囲領域を通過したならば、元素iによるエネルギー損失と、上式に示した，$\langle T_n \rangle_S + \langle T_e \rangle$ の平均的エネルギー損失を同時に受けることになり、また、元素jの周囲領域を通過したならば、元素jに、衝突径数で決まるエネルギーを与えると同時に、$\langle T_n \rangle_S + \langle T_e \rangle$ のエネルギーを基板の周囲原子に与えるとして解析を行なう。

いま、エネルギー分布 $F_{m-1}(E)$ を持つイオンが、元素Sの周囲領域に入射して、δR進んだ後の分布 $F_{mi}(E)$ は、式（4.17）（4.18）および（4.9）から求めたものを用いて、式（4.11）により求められるから、入射確率 P_i を考慮すると、$F_{m-1}(E)$ なるエネルギー分布を持つイオンが、化合物基板中をδR進んだ後のエネルギー分布は次式で与えられる。

$$F_m(E) = \sum_{i=1}^{k} P_i \, F_{mi}(E) \qquad (4.19)$$

また、化合物基板中のイオンの飛程分布は、$F_{m-1}(E)$ と $F_m(E)$ とから、元素基板の場合と、全く同様に求めることができる。

計算結果の一例を図4-12に示す。同図は、Thomas-Fermi ポテンシャルを仮定し、かつ、軌道電子によるエネルギー損失をも考慮に入れて求めた SiO_2 中の50keV Arの飛程分布をであり、式（4.12）のCが約20となるようにδRとして、24Åを仮定した。同図より、本解析法は、化合物基板に対しても、ほぼ妥当な結果を与えると結論できる。

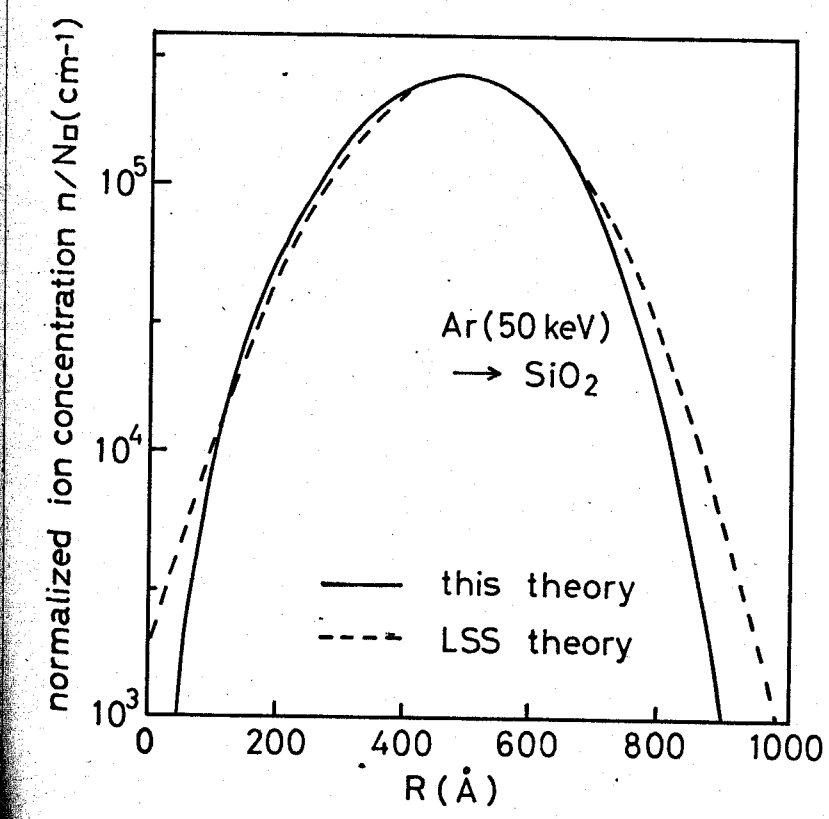


図4-12
SiO_2 基板中の
50keV Arイオンの
飛程分布
（T-F pot.）

4.4 本章のまとめ

本章では、基板中の入射イオンのエネルギー分布を求める方法と、そのエネルギー分布に基づいて、イオンの飛程分布を計算する方法について検討を行ない、以下のことを明らかにした。

(1) 基板中におけるイオンのエネルギー分布を求めるため、基板中に仮想的な厚さδRの薄層を考え、薄層通過ごとのイオンのエネルギー分布を求める方法について検討を行なった。イオンのエネルギー分布は、最近接原子に確率的に与えるエネルギーと、周囲原子および軌道電子に平均的に与えるエネルギーとを考慮して求め、本解析法により求まるエネルギー分布の平均値が、LSS理論から求まる平均エネルギーと一致することを示して、解析法の妥当性を明らかにした。

(2) 基板中におけるイオンの静止条件について考察を行ない、基板中のイオンのエネルギー分布から、イオンの飛程分布を求める方法について検討した。本解析法から求まる飛程分布を、LSS理論から求まるガウス形の飛程分布と比較し、(i) 仮想的な薄層の厚みδRを20原子層とかなり大きくとっても、平均飛程はよく一致すること、(ii) δRが大きい場合には、飛程分布の分散がLSS理論から求まる分散よりも少さくなること、および (iii) 表面付近の分布に関しては、δRを小さくしても、LSS理論から求まるガウス形の飛程分布とは一致しないことを明らかにした。

(3) LSS理論において、飛程の高次モーメントを用いて、ガウス分布を補正した結果は、表面付近の分布を含めて全体に、本解析法から

求まる結果と良く一致することを示し，重いイオンを打込んだ場合には，表面付近の濃度が，ガウス分布よりも低くなる場合のあることを明るかにした。この結論は，すでに報告されているSi中のInイオン分布に関する実験結果[141]と定性的に良く一致し，本解析法の有用性が示された。

(4) 最大イオン濃度の検討より、平均飛程付近の分布を議論する場合には、ΔRを必ずしも原子間距離にとる必要はなく、いくつかの原子層をまとめてΔRとしても、工学上有用な飛程分布が得られることを示した。また、工学上有用な飛程分布を求めるために必要なΔRを与える式を導き、原子核間のポテンシャルや、入射イオンの種類、エネルギーが異なる場合にも、同式が有効であることを示した。

(5) 以上の検討に基づいて、原子核間の相互作用ポテンシャルとして、実験事実を最も良く説明すると考えられている、Thomas-Fermiポテンシャルを用い、また、軌道電子によるエネルギー損失をも考慮して、基板中のイオンのエネルギー分布と飛程分布とを求めた。その結果、飛程分布は、どのようなポテンシャルを仮定しても、ほぼガウス分布で与えられるが、イオンのエネルギー分布は、ポテンシャルによつて大きく異なることを明らかにした。

(6) 本解析を化合物基板に適用する方法について検討を行ない、得られた飛程分布とLSS理論を用いた結果との比較から，本解析法は化合物基板についても、妥当な結果を与えることを示した。

従来、基板中のイオンのエネルギー分布を求めた報告はなく、飛程分布からの類推により、衝突回数が多くなれば、平均エネルギーを中心とした、ガウス分布になるのではないかと考えられていた。しかしながら、本章で求めたように、イオンのエネルギー分布は、ガウス分布にはならず、原子核間のポテンシャルの仮定によっても、大きく異なることが明らかとなった。

エネルギー分布が、ガウス分布にならない理由としては、イオンが微少距離進んだ場合、大部分のイオンは、ほとんどエネルギーを失なわないのに対し、ごく一部のイオンは、持っているエネルギーの全部を放出するような衝突を起し、一定のエネルギーで入射したイオンでも、微少距離進んだ後に、低エネルギー側に長く尾を引く分布となり、エネルギー分布が平均値の上と下とで、非対称となってしまうためと考えられる。

なお、最近、イオンの飛程分布をガウス分布と仮定して、飛程分布からエネルギー分布を逆算する方法が報告されているが[160]、この方法を用いた場合には、飛程分布が、ガウス分布からずれる表面付近で、正確なエネルギー分布を表わしていないと考えられる。

第5章　多層構造基板中の飛程分布の理論解析

本章では、半導体表面上に酸化膜層などの付いた多層構造基板中のイオンの飛程分布を考える。多層構造基板の場合、入射イオンに対する阻止能は、各々の層において異なるから、飛程分布全体を一つのガウス分布で近似することは意味がなく、したがって、章3で解析したＬＳＳ理論に基づく方法をいることはできない。

一方，前章においては，基板中に想定した1つの薄層を通過した後のイオンのエネルギー分布が，つぎの薄層に対する入射エネルギー分布となるとえて解析を行ない，得られた飛程分布が妥当であることを示した。したがて，多層構造基板の場合にも，層の境界面におけるイオンの反射や，境界に特有なエネルギー損失が無視できれば，第1層の終端におけるエネルギ分布（前章で示したように，この分布は広がりを持っている）を持つイオが，第2層中に打込まれると考えて，各層中のイオンの飛程分布を求めるとができる。

本章では，境界面における特有な現象を生じさせるポテンシャルは，イオンの持つエネルギーに比べて十分小さいと考えてこれを無視し，* 各層の界面でイオンのエネルギー分布が連続であるという仮定の下に，多層構造板中のイオンの飛程分布を求める。

この場合，第1層中のイオン分布は，単一層基板に同一条件で打込んだ合のイオン分布と同一な分布となり，ガウス分布の一部で表わされると考られるが，第2層中のイオン分布は，第1層の終端におけるエネルギー分を持つイオンが打込まれた場合の分布となり，必ずしも，ガウス分布あるは，ガウス分布の一部とはならない。

---

*熱拡散法の場合には，境界面におけるポテンシャルの影響は無視することができないから，このポテンシャルの大きさは，不純物原子の得る熱エネルギー（～0.1eV）と同程度と考えることができる。これに対し，打込みエネルギーは通常数十～数百keVであり，境界付近でイオンの持つエネルギーが十分小さくなったとしても，境界面のポテンシャルの影響は無視できると考えられる。

↓次ページ

本章では、まず、第1節で章子の解析法に基づいて、多層構造基板中のイオンの飛程分布を求め、その結果の物理的解釈に基づいて、第2節でSiO_2-Siなどの基板中のイオン射影飛程分布を近似的に求める方法について述べる。また、第3節では、第2節の結果を用いて、MOSFETのゲート酸化膜を通して、不純物イオンをチャンネル領域に導入した場合の閾値電圧制御特性について述べる。なお、本章で行なった理論解析の実験的検証については、章7で述べる。

** 基板中の任意の深さにおける、イオンのエネルギー分布を求めるために、"拡張されたLSS理論"が提案されているが、[160],[161] 拡張されたLSS理論を用いて多層構造基板中のイオン分布を求めた報告はない。

5.1 イオンのエネルギー分布に基づく解析法

本節では、前章の解析法を、多層構造基板に適用する方法について述べる。計算は、まず、簡単な r^{-2} ポテンシャルを仮定した場合について行ない、多層構造基板中のイオン分布に特有な結果を、定性的に検討する。つぎに、Thomas-Fermi ポテンシャルを用いた場合の飛程分布を計算し、SiO_2-Si 基板中のイオンの飛程分布が、SiO_2 中の飛程分布と、Si 中の飛程分布を組合せることにより、近似的に表現できることを定量的に示す。

5.1.1 SiO_2-Si, および, SiO_2-GaAs 基板中のイオン分布の定性的検討

本項では、原子核間のポテンシャルとして、r^{-2} ポテンシャルを仮定し、軌道電子によるエネルギー損失を無視した場合について、SiO_2-Si基板、および, SiO_2-GaAs 基板中の50keV Sb イオンの飛程分布を求める。

入射イオンが Sb のように重い場合には、50 keV 以下のエネルギーでは、軌道電子によるエネルギー損失は、十分無視できる。* また、r^{-2} ポテンシャルは、Thomas-Fermi ポテンシャルの第一近似ポテンシャルとして、用いられるものであるから、この仮定の下に求めた多層構造基板中のイオン分布は、少くとも定性的には、実験的に求まる射影飛程分布と一致すると考えられる。

多層構造基板中の第2層以後のイオンの分布は, 第1層の終端におけるエネルギー分布を求め、そのようなエネルギー分布を持ったイオンが、第2層に打込まれると考えて求める。

---

* Si中のSbイオンの電子阻止能が、核阻止能に等しくなるエネルギーは、約 4.3 MeV である。

第4章の解析において、基板中のイオンのエネルギー分布は、δRごとに求められることが明らかとなった。また、δRは、式(4.12)で与えられる値よりも、小さく選べば、工学上有用な飛程分布が得られると結論できた。したがって、δRを適当に選ぶことにより、第4章の解析法により、第1層中のイオンの飛程分布と、第1層の終端におけるイオンのエネルギー分布とを求めることができる。

つぎに、第2層中のイオンのエネルギー分布および、飛程分布は式(4.11)の$F_{m-1}(E)$に第1層の終端におけるエネルギー分布を代入し、$F(E',E)$に、イオンと第2層基板原子との衝突を考慮してきまる分布関数を代入することにより、求めることができる。

この場合、第一層中のδRと、第2層中のδRとは必ずしも一致させる必要はない。

SiO_2-Si および SiO_2-GaAS基板中の50keV Sbイオンの飛程分布を図5-1, 5-2に示す。図5-1はSiO_2の厚みが115Åの場合であり、図5-2は230Åの場合である。同図には、SiO_2基板中のSbイオンの分布も同時に示してある。なお、本章の解析において、特にことわらない限り、SiO_2の比重は、2.66と仮定されている。

同図より、多層構造基板中のイオンの飛程分布に関して、以下のことが結論される。

(1) 一般に、層の境界面で、イオン濃度分布に段ができる。

(2) GaAsのように、SiO_2に比べて特性エネルギー損失[$N(S_n+S_e)$]*の大きな物質を、第2層とした場合には、第2層表面におけるイオン濃度の方が、第1層の終端におけるイオン濃度よりも高くなり、逆にSiのように、SiO_2よりも特性エネルギー損失の小さな物質を、第2層とした場合には、第2層の表面におけるイオン濃度は、第一層の

---

* 文献(147)の中で、Nuclear-Energy Loss + Electronic Energy Loss に相当する。

終端における濃度よりも低くなる。

(3) SiO_2 のように、飛程分布の分散が小さく、したがって、最大イオン濃度の大きな基板を表面に付けることより、第2層中の最大イオン濃度を、第2層基板に、表面層を付けずに直接同じ量の、イオン注入を行った場合よりも大きくすることができる。一例として、図5-2の GaAs 中の最大イオン濃度は、GaAs のみからなる基板中の Sb イオンの最大濃度より、約60%大きい。

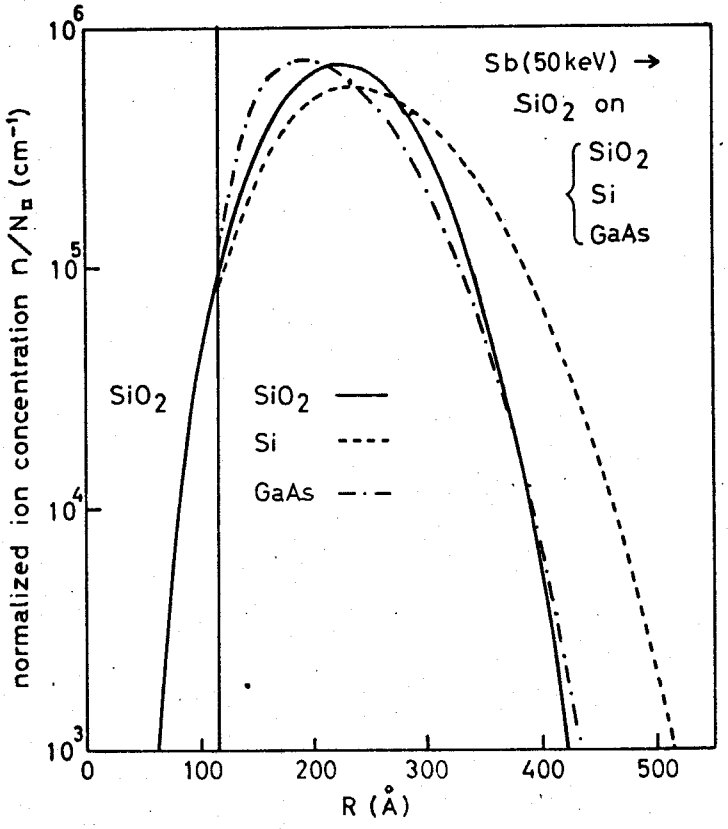


図5-1 SiO_2-Si基板および、SiO_2-GaAs基板中の50 keV、Sbイオンの飛程分布。(SiO_2の厚み115 Å.) (r^{-2} pot.)

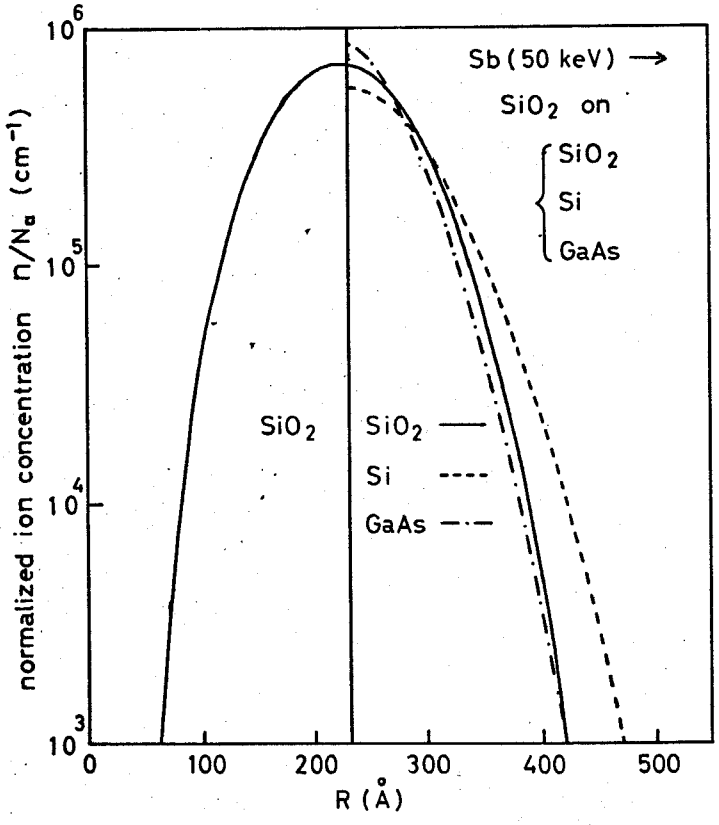


図5-2 SiO_2-Si基板および、SiO_2-GaAs基板中の50 keV、Sbイオンの飛程分布。(SiO_2の厚み230 Å.) (r^{-2} pot.)

5.1.2 SiO_2-Si 基板中のイオン分布の定量的検討

本項では、原子核間のポテンシャルとして、Thomas-Fermi ポテンシャルを仮定し、かつ、軌道電子によるエネルギー損失をも考慮して、SiO_2-Si 基板中のイオンの飛程分布を求め、2層構造基板中のイオン分布に関する定量的検討を行なう。

一例として、SiO_2-Si 基板中に 50keV で打込まれた Ar イオンの飛程分布を考える。Ar イオンは、Si 原子に較べて、十分重いとはいえないので、本項で求まる飛程分布を、そのまま実験的に求まる射影飛程分布と見なすことはできない。飛程分布から、射影飛程分布を求める方法については、次節で述べる。

SiO_2 中および Si 中の SR をそれぞれ 24Å, 27.1Å (式(4.12)の $C \geq 20$) と仮定して求めた飛程分布を 図5-3 に実線で示す。同図の SiO_2 中の飛程分布は、図4-12 に示した SiO_2 基板に対する結果と同一である。

同図と、図 5-2 で示した γ^{-2} ポテンシャルを仮定して導いた SiO_2-Si 基板中の Sb イオンの飛程分布とを比較すると、定量的には若干違いがあるが、定性的には全く同一の結果を示し、境界面でイオン濃度に段ができ、特性エネルギー損失の大きい SiO_2 中の方が濃度が高いことがわかる。また、この定量的な食い違いの原因は、仮定したポテンシャルの違いによるものと考えることができる。

つぎに、図 5-3 の破線は、図4-11 で示した Si 基板中の Ar イオンの飛程分布を、SiO_2 中に止まるイオン数に相当する距離だけ、表面から除いて示したものである。これは、同じ量のイオンを Si 基板に直接打込んだ

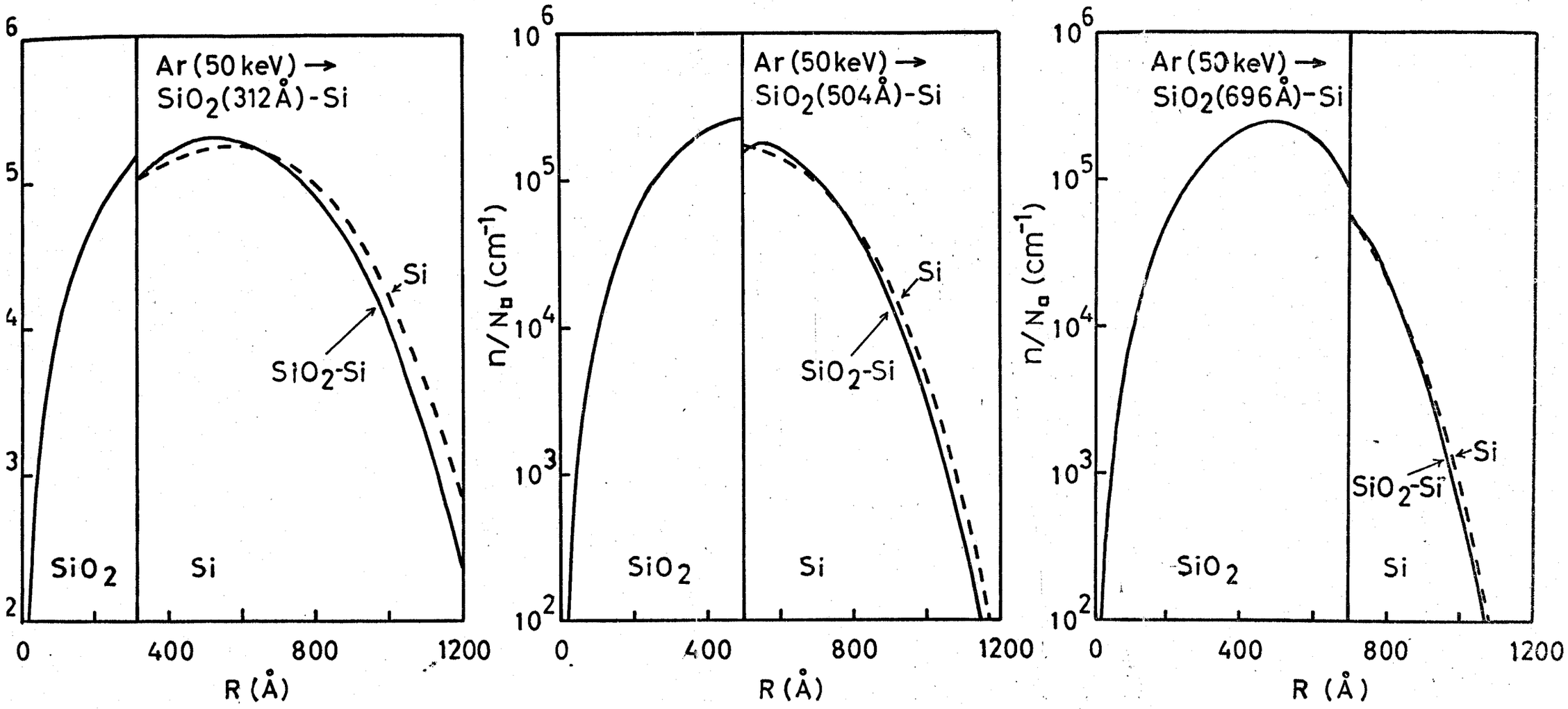


図 5-3　SiO_2-Si 基板中の 50 keV Ar イオン分布 (T-F pot.)

後に、Si中のイオン数が、SiO_2層を通して打込んだ場合のSi中のイオン数と等しくなるまで表面からエッチングした場合のイオン分布と等しい。

同図の実線と破線との比較より、SiO_2とSiとの境界面が、SiO_2中のArの平均飛程付近、あるいは、平均飛程よりも表面側にある場合（同図の(a), (b)の場合）には、Si中の最大イオン濃度が、Si基板に直接打込んだ場合よりも約10%多く、また、Si中に深く打込まれるイオン数が少ないと結論できる。一方、SiO_2層の厚さが、SiO_2中のArの平均飛程よりも厚い場合（同図（c）の場合）には両者はよく一致している。

なお、この両者のデータの精度は必ずしも高くないが、両者とも同じ手法で、かつ、同じCの値を使ってきめたものであるから、少なくともこの結論は定性的には妥当と考えられる。

いずれにしても、両者の違いは10%以内であるから、SiO_2-Si基板中のArイオンの飛程分布は、第一近似として、SiO_2中の実線と、Si中の破線の組合せとみなすことができる。すなわち、SiO_2-Si基板中の飛程分布は、SiO_2基板に直接打込まれたイオンの飛程分布と、Si基板に直接注入されたイオンの飛程分布（ともにLSS理論を用いてガウス分布で近似できる。）とを、全体のイオン数が、打込みイオン数に一致するように、境界面でつなぎ合わせることにより近似的に表現できるといえる。

次節では、この結論を用いて、SiO_2-Si基板中のイオンの射影飛程分布を求めることを試みる。

5.2 多層構造基板中の射影飛程分布に関する近似解析法

本節では，図5-3に示したSiO_2-Si基板中のArイオンの飛程分布から、射影飛程分布を導く方法について述べ、さらに、その結果から、一般のイオンを多層構造基板に打込んだ場合の射影飛程分布を近似的に求める方法について述べる。

5.2.1 近似解析法の導出

図5-3より，SiO_2-Si基板中のArイオンの射影飛程分布を、以下に示す2つの方法で求める。

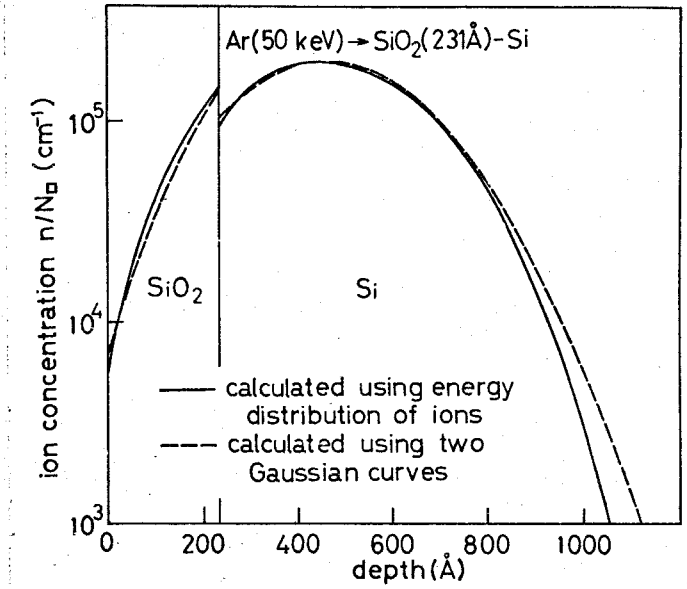
第1の方法は、基板中のイオンのエネルギー分布に基づいて求めたSiO_2-Si基板中の飛程分布（図5-3の実線）から、射影飛程分布を求める方法である。

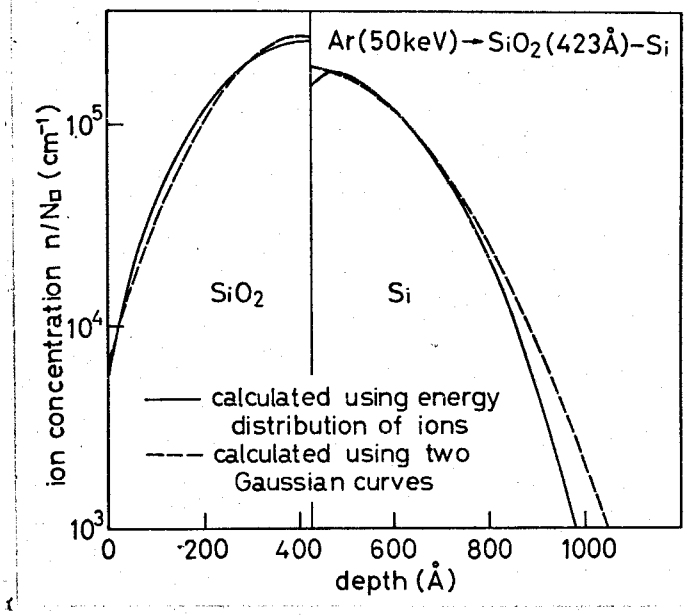
LSS理論を用いて計算した50keV ArのSiO_2中および、Si中の飛程分布の標準偏差（153Å, 213Å）は、射影飛程分布の標準偏差（147Å, 201Å）にほぼ等しい。したがって、同理論によるSiO_2中の平均飛程（481Å）と平均射影飛程（400Å）の差だけ、本解析法により求まる飛程分布を表面側にずらした分布が、近似的な射影飛程分布を与えると考えることができる。このようにして求めた、射影飛程分布を図5-4に実線で示す。

第2の方法は、図5-3に関連して述べた飛程分布の合成を使う方法である。この合成が、射影飛程分布についても成立し、かつ、各々の層内の分布が，LSS理論から導かれる分散を持つガウス分布であるという仮定で求めた結果を図5-4に破線で示す。*

---

* 第1層中のガウス分布の平均値はLSS理論と一致するが，第2層以後については，LSS理論を用いて求まる第2層物質単独からなる基板中の平均射影飛程とは，一般に一致しない。





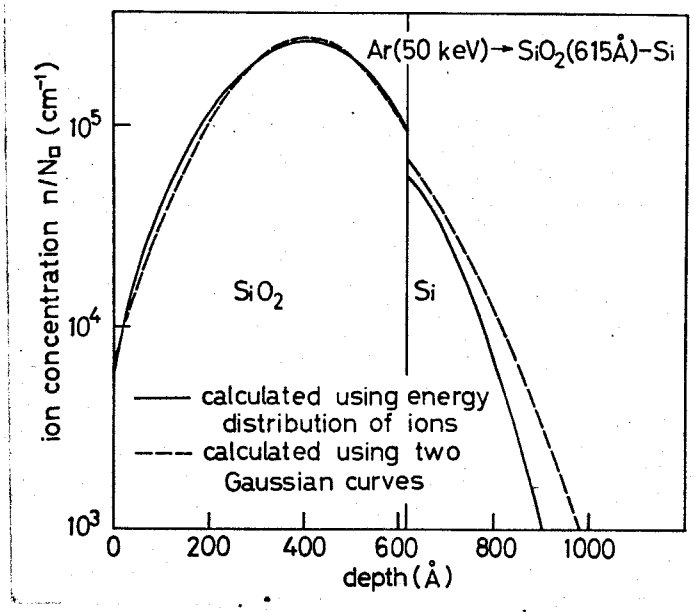


図5-4

SiO_2-Si基板中の50 keV Arイオンの射影飛程分布。$N_□$：単位面積当りの打込みイオン数。(T-F pot.)

同図により、２つの方法を用いて理論的に導いた射影飛程分布は良く一致し、SiO_2-Si基板中の射影飛程分布は，ＬＳＳ理論の結果を組合せることにより、近似的に推定できることが明らかとなった。

なお，図５-５は，後者の方法を概念的に示したものである。

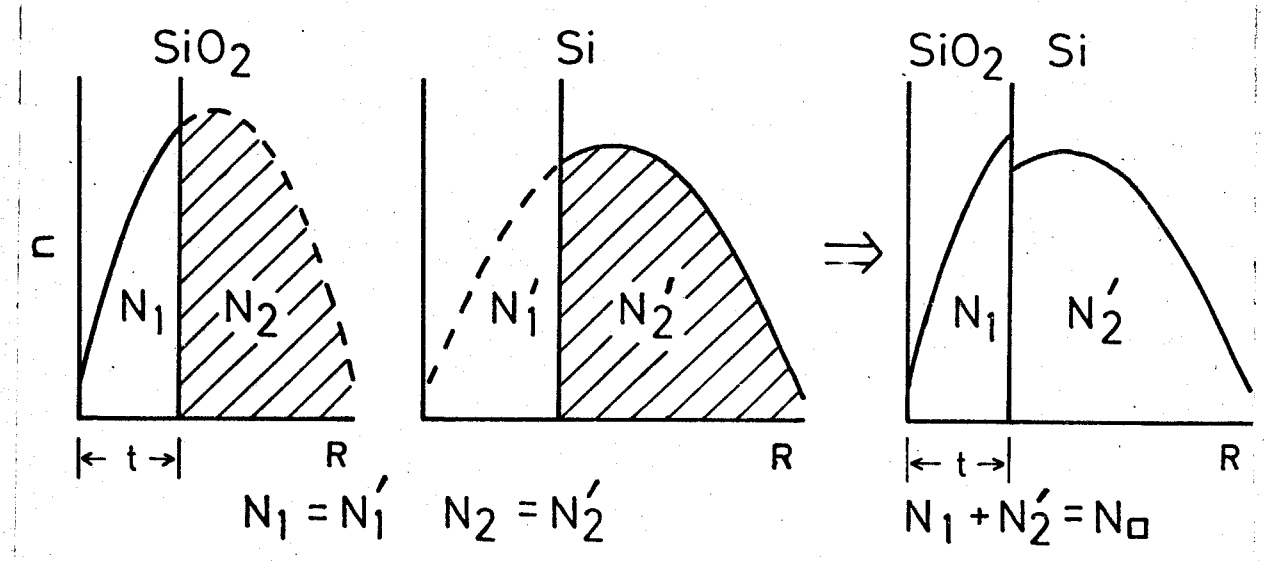


図５-５ SiO_2-Si 基板中の射影飛程分布の合成法。

つぎに、図５－５ に示す近似的な方法が、どのような場合に適用できるかについて検討する。このため、まず、ダイアモンドと石墨のように、同じ元素構成で、密度だけが異なる物質からなる２層構造基板を考える。

ダイアモンド中，および，石墨中のイオンの$\langle R_p \rangle$ および$\langle \Delta R_p \rangle$は、イオンとＣ原子との衝突を考慮して求まる阻止能と、それぞれの原子密度の積によって表わされるから、両基板中の$\langle \Delta R_p \rangle / \langle R_p \rangle$ の値は等しく、原子密度で規格化した空間における射影飛程分布は、両基板に対して同一のも

のとなる。

したがって、ダイアモンドと石墨とからなる基板中のイオンの分布を求めるには、まず、原子密度で規格化した空間において、全体を一つのガウス分布と仮定して求め、その後に、それぞれの層の原子密度を考慮して、ダイアモンド中の分布と、石墨中の分布とを、実空間の分布に直せば良い。この場合には、原子密度の比が、そのまま $\langle \Delta R_p \rangle$ の比になっているから、この変換は図5-5に示した方法と一致する。

上で述べた例は、同じ元素で構成されている特別な2層構造基板を考えたものであるが、イオンの射影飛程分布が、$\langle R_p \rangle$ と $\langle \Delta R_p \rangle$ のみで、ほぼ決まることを考慮すると、同じ元素から構成されている場合でなくても、$\langle \Delta R_p \rangle / \langle R_p \rangle$ の値が等しければ、それぞれの基板中の $\langle \Delta R_p \rangle$ で規格化した空間においては、両基板に打込まれたイオンの射影飛程分布は、同一のものとなる。

したがって、$\langle \Delta R_p \rangle$ で規格化した空間で、同じ距離進んだイオンのエネルギー分布は、どちらの基板でも同一の形状をしていると考えることができ、エネルギー分布の連続条件から求まる2層構造基板中の分布は、やはり、全体として、一つのガウス分布で表わされる。この場合に、規格化された空間のガウス分布を、実空間の分布に直すには、図5-5に示すように、それぞれの層の $\langle \Delta R_p \rangle$ を用いて行なえばよい。

以上の考察より、それぞれの基板に同じイオンを打込んだときに、$\langle \Delta R_p \rangle / \langle R_p \rangle$ の値が等しければ、図5-5に示す方法で、多層構造基板中のイオン分布を合成できることがわかった。

$\langle \Delta R_p \rangle / \langle R_p \rangle$ の値が、打込みイオンの種類および、エネルギーに無関係に一定なのは、厳密には、同一元素からなっていて、密度だけが異なる基板の組合せだけと考えられるが、原子番号の近い基板の組合せの場合に

は、イオンの種類および、エネルギーによらず $\langle \Delta R_p \rangle / \langle R_p \rangle$ の値はほぼ一致する。

Thomas-Fermi ポテンシャルを仮定して求めた Si, SiO_2, Al_2O_3, Si_3N_4 および GaAs 基板中における $\langle \Delta R_p \rangle$ と $\langle R_p \rangle$ の比 Γ ($= \langle \Delta R_p \rangle / \langle R_p \rangle$) を、打込みイオンの質量に対して示したのが図 5-6 である。同図より Γ は、打込みイオンの質量によって変化するが、変化の様子は、どの基板についてもほぼ同一であり、Si 基板の値で規格化すると、入射イオンの種類によらず、ほぼ一定となる。(Si : SiO_2 : GaAs = 1 : 0.9 : 1.4)

とくに、Si, SiO_2, Si_3N_4, および Al_2O_3 基板中の Γ の値は、イオンの種類によらず、ほぼ一致していると見なせるから、これらの4種の物質を組合せて作った多層構造基板中のイオンの分布は、Bイオンなどの軽いイオンを打込んだ場合にも、LSS理論から求まる射影飛程分布を、図 5-5 に示す方法で合成することにより、近似的に表現できると結論できる。

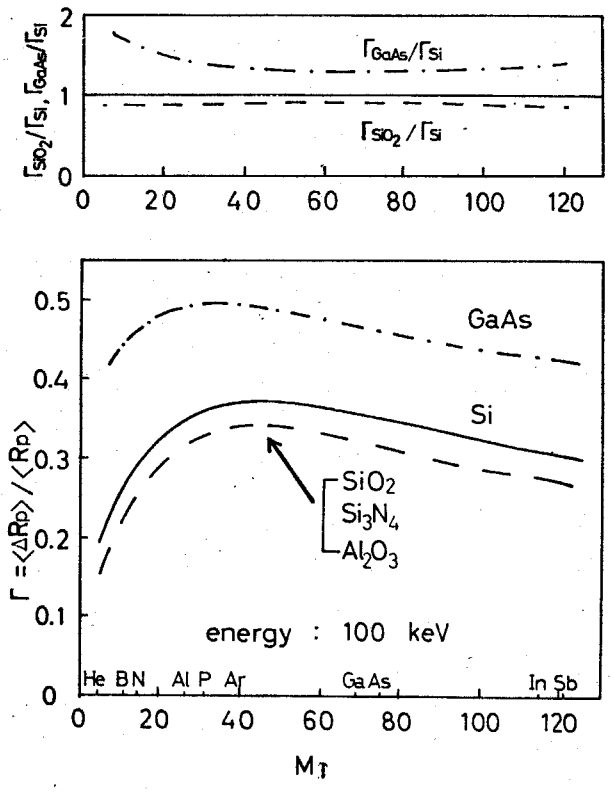


図5-6 各種基板中における $\langle \Delta R_p \rangle$ と $\langle R_p \rangle$ の比。(打ち込みエネルギー 100keV) (T-F pot.)

また，$\langle \Delta R_p \rangle / \langle R_p \rangle$ の一致しない，SiO_2 - GaAs 基板中のイオンの分布は，図5-2に示すように，SiO_2 中のイオン分布と，GaAs 中のイオン分布の組合せと見なすことはできない。しかしながら，$\Gamma_{GaAs} / \Gamma_{SiO_2}$ で与えられる相対的な飛程分布の形状は，入射イオンによらず，ほぼ一定であるから，軽いイオンを SiO_2-GaAs 基板に打込んだ場合の飛程分布の形状は，定性的には，重いイオンを打込んだ場合の図5-1，5-2の結果と一致すると考えられる。

5.2.2 SiO_2-Si, Al_2O_3-Si, Si_3N_4-Si 基板中のイオンの射影飛程分布

本項では、Si 上に、SiO_2, Al_2O_3, Si_3N_4 などの表面層が、付いた基板中のイオンの射影飛程分布を求める。

SiO_2, Al_2O_3, Si_3N_4 基板中の $\langle \Delta R_p \rangle$ と $\langle R_p \rangle$ の比は、図 5-6 に示すように、打込みイオンの種類によらず、0.5% 以下の精度で一致する。これは、それぞれの基板の平均原子番号、および、平均原子量が極めて近いことによるためと考えることができる。(SiO_2, Al_2O_3, Si_3N_4 の平均原子番号、平均原子量は、それぞれ、(10, 20.0), (10, 20.4), (10, 20.0) である。)

しかしながら、$\langle \Delta R_p \rangle$ と $\langle R_p \rangle$ の絶対値は、各々の物質の密度の違いにより、異なっており、同じ厚さの表面層を付けた場合にも、Si 中のイオン分布は、それぞれ異なってくる。以下の計算は、SiO_2, Al_2O_3, Si_3N_4 の密度を、それぞれ、2.25, 3.0[162], 2.8[163] と仮定して行なった。

図 5-5 に、図式的に示した方法を数式的に示すと以下のようになる。まず、基板が第1層物質のみからできている場合のイオンの、射影飛程分布の平均値および、標準偏差を $\langle R_{p1} \rangle$, $\langle \Delta R_{p1} \rangle$, 第2層目のみからできている場合の平均値、および標準偏差を $\langle R_{p2} \rangle$, $\langle \Delta R_{p2} \rangle$ とすると、厚さ d の表面を通して、第2層中へ打込まれるイオンの確率は次式で与えられる。

$$1 - \frac{1}{\sqrt{2\pi}\langle \Delta R_{p1} \rangle} \int_{-\infty}^{d} e^{-\frac{(Z - \langle R_{p1} \rangle)^2}{2\langle \Delta R_{p1} \rangle^2}} dZ \qquad (5.1)$$

ここで、第2項の積分下限を0とせずに、$-\infty$ としたのは、ガウス分布の近似を用いると、分布関数が基板表面から外側に、はみ出すことを考慮し

たりである。ただし、通常の場合には、積分下限を0としても、結果に大きな影響はない。

つぎに、第2層中のイオンの射影飛程分布は、図5-5より、標準偏差が$\langle \Delta R_{p2} \rangle$で与えられるガウス分布の一部となり、かつ、第2層中のイオンの存在確率は式(5.1)となるから、第2層中のガウス分布の平均値$\langle R_p' \rangle$は一般には$\langle R_{p2} \rangle$とは一致せず、以下のように与えられる。ここで、$\langle R_p' \rangle$は必ずしも、第2層基板中に存在するとは限らない。

$$1 - \frac{1}{\sqrt{2\pi}\langle \Delta R_{p1} \rangle} \int_{-\infty}^{d} e^{-\frac{(z-\langle R_{p1} \rangle)^2}{2\langle \Delta R_{p1} \rangle^2}} dz = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\langle \Delta R_{p2} \rangle} \int_{d}^{\infty} e^{-\frac{(z-\langle R_p' \rangle)^2}{2\langle \Delta R_{p2} \rangle^2}} dz \tag{5.2}$$

ここで、$(z-\langle R_{p1} \rangle)/\langle \Delta R_{p1} \rangle = u$, $(z-\langle R_p' \rangle)/\langle \Delta R_{p2} \rangle = t$とおいて、上式を書き直すと、次式が得られる。

$$1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\frac{d-\langle R_{p1} \rangle}{\langle \Delta R_{p1} \rangle}} e^{-\frac{u^2}{2}} du + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\frac{d-\langle R_p' \rangle}{\langle \Delta R_{p2} \rangle}}^{\infty} e^{-\frac{t^2}{2}} dt \tag{5.3}$$

したがって、上式が成立つためには、右辺第1項の積分上限と、第2項の積分下限が一致しなくてはならないから、$\langle R_p' \rangle$は次式で与えられる。

$$\boxed{\langle R_p' \rangle = d + \frac{\langle \Delta R_{p2} \rangle}{\langle \Delta R_{p1} \rangle} (\langle R_{p1} \rangle - d)} \tag{5.4}$$

すなわち、2層構造基板中の第1層中のイオン分布は、$\langle R_{p1} \rangle$と$\langle \Delta R_{p1} \rangle$を、平均値および、標準偏差とするガウス分布の一部で与えられ、第2層中のイオン分布は、$\langle R_p' \rangle$, $\langle \Delta R_{p2} \rangle$ を平均値、および標準偏差とするガウス分布の一部で与えられることになる。また、3層以上からなる基板についても、それぞれの層に対して$\langle \Delta R_p \rangle / \langle R_p \rangle$の値が、ほぼ等しければ、全く同様な議論が成立つ。

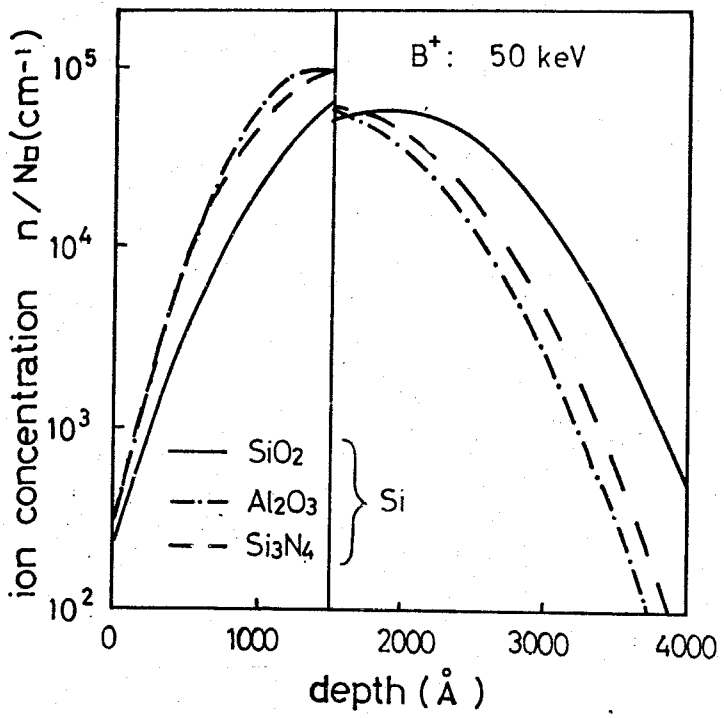


図5-7 SiO_2、Al_2O_3 および Si_3N_4 層の付いた Si 基板中の 50 keV、B イオンの射影飛程分布（T-Fpot.）

1500Å の SiO_2, Al_2O_3, Si_3N_4 層のついた Si 基板に 50 keV で注入された B イオンの分布* を図5-7に示す。

同図に示すように、同じ膜厚の表面層を付け、同じエネルギーで、同じイオンを打込んだ場合にも、Si中のイオン分布は、それぞれ異なっている。

しかしながら、図5-6で示したように、SiO_2, Al_2O_3, Si_3N_4 に関しては $\langle \Delta R_p \rangle / \langle R_p \rangle$ の値が、0.5％以内で一致しており、また図5-8に示すように、この比はエネルギーを変えた場合にもほとんど変化しないから、等価膜厚を考えることにより、これら3種の膜をつけて Si 中に打込まれたイオンの濃度分布を統一的に表現することができる。

---

* Si中の B イオンの電子阻止能として Eisen が実験的に求めた値[121]を用いると、理論分布が実験値と良く一致することが知られており[122]、Se の実験値を用いると、SiO_2 中の B イオンの理論分布も、実験値と、より良く一致すると考えられる。しかしながら、B イオンと、O, Al, N などの組合せに対しては、電子阻止能が実験的に求まっていないから、本節の計算は、すべて LSS 理論より求まる Se の値を用いて行なった。

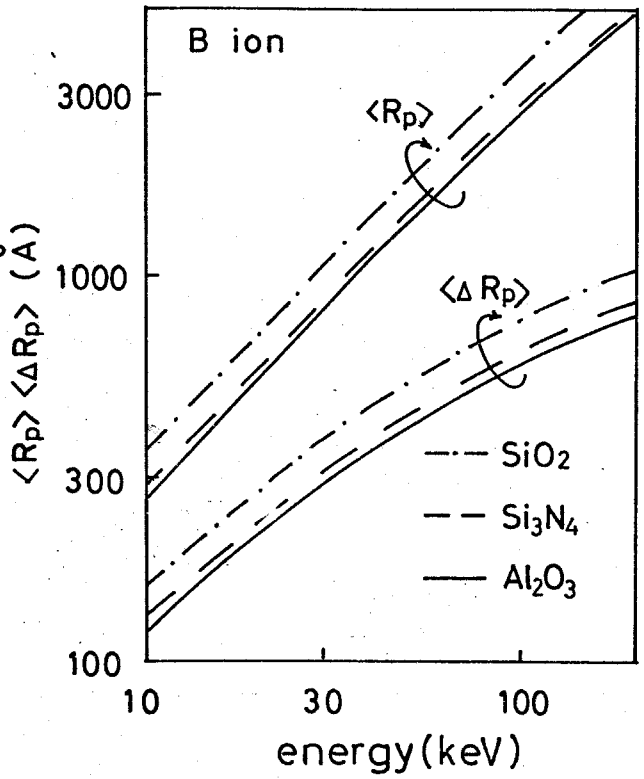


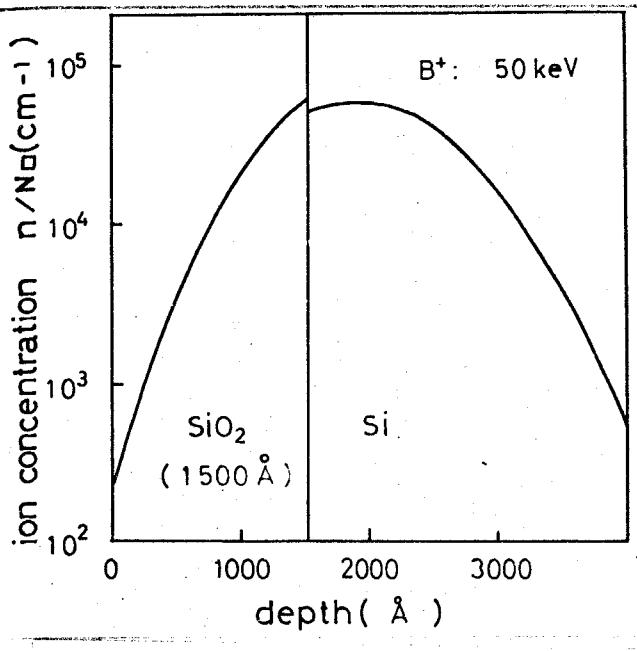
図5－8： SiO_2, Al_2O_3 Si_3N_4 基板中のBイオンの $\langle R_p \rangle$ および $\langle \Delta R_p \rangle$ （基板の比重は，それぞれ，2.25, 3.0, 2.8と仮定されている）(T-F pot.)

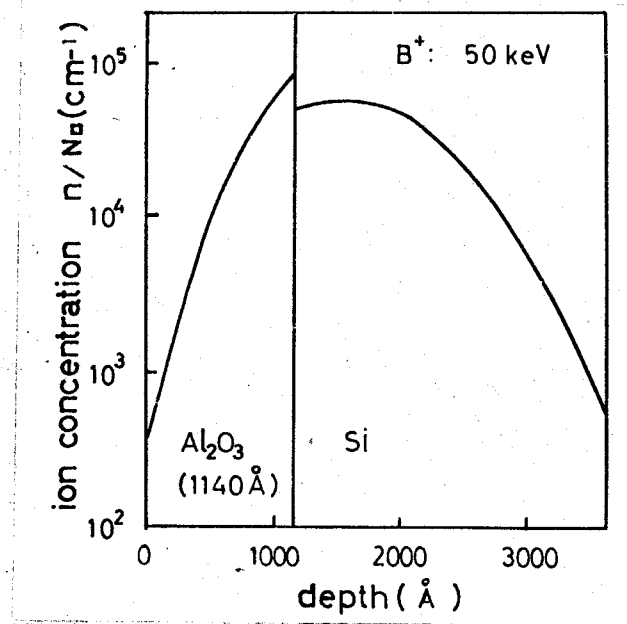
図5－6および図5－8の結果から、打込みイオンの種類、エネルギーによらない等価厚みとして次の関係が得られる。

SiO_2	Al_2O_3	Si_3N_4
1000Å	760Å	820Å

すなわち、1000Åの SiO_2 層を通して、Si中に打込まれたイオンの分布は、760Åの Al_2O_3，あるいは820Åの Si_3N_4 層を通して、Si中に打込まれたイオンの分布と等しいことになる。なお、上記の値は、膜の比重が異なる場合には、異なってくる。

図5－9は，1500Åの SiO_2，1140Åの Al_2O_3，および1230Åの Si_3N_4 を通してSi基板中に打込まれた50keVのBイオンの分布を示している。この場合には、それぞれの膜厚の比は等価厚みになっているから、Si中のイオン分布は全く等しくなる。





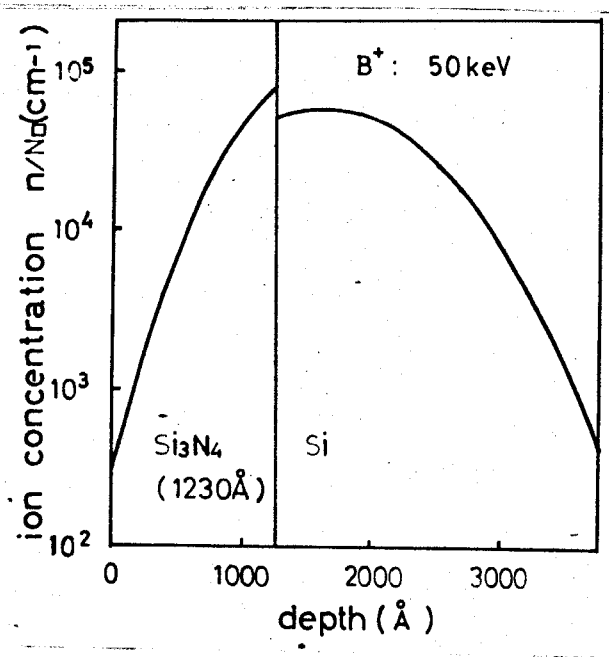


図5-9 SiO_2、Al_2O_3 および Si_3N_4 層の付いた Si 基板中の 50 keV、Bイオンの分布。(等価厚みの層が付いた場合。) (T-F pot.)

5.3 MOSFETのゲート閾値電圧制御のための最適打込み条件

本節では、前節で求めた SiO_2-Si 基板中のイオン射影飛程分布を用いて、MOSFET のゲート閾値電圧制御のためにイオン注入を行なう場合の、最適打込み条件を求める。

本節の計算は、Dry O_2 による熱酸化で製作された SiO_2 層を想定して、比重 2.25, 比誘電率 3.4 を用いるが、他の方法で製作した場合には、それぞれの比重および、比誘電率を用いて補正すれば良い。また前節の結果より、Al_2O_3-Si, Si_3N_4-Si 基板を用いて、MISFET を製作する場合にも、等価膜厚と、比誘電率で、補正することにより、本節の結果を用いることができる。

MOSFET のゲート酸化膜を通して、Si 中にイオン注入を行なうと、SiO_2 中および Si 中に打込まれた不純物の効果と、両者に発生する格子欠陥の効果とが考えられるが、この目的のためにイオン注入を行なう場合には、打込み量が少ないため、アニール処理により格子欠陥の影響を除去することが可能であり[38]、また、SiO_2 中に止まる不純物原子は、中性状態となって、電気的特性には、影響を及ぼさないと考えられる。

したがって、ゲート閾値電圧をシフトする要因としては、Si 中に打込まれた不純物イオンのうち、電気的に活性化されたイオンだけを考えればよい。いま、活性化されたイオンの量を、単位面積当り N_D' とすると、閾値電圧の変化 ΔV_T は次式で与えられる[38]。

$$\Delta V_T = q N_D' / C_{ox} \qquad (5.5)$$

ここで、q は単位電荷, C_{ox} は、酸化膜層の単位面積当りの容量である。ただし、式(5.5)より明らかなように、ΔV_T は酸化膜層をコンデンサーと見なした時の両端の電圧であり、式(5.5)が成立つのは、打込みイオンが、SiO_2 と Si との界面に十分近い位置に止っている場合だけである

が，打込みイオン数が少ない場合には，このような関係が満足されることは，実験的に求まっている。(38)

いま、酸化膜厚が一定の場合の最適な打込み条件を考える。まず、打込みエネルギーが高くなると、打込まれた不純物は、ほとんど全部Si中に入ることになり，活性化率を一定とすると、打込み量N_0が一定でも、N_0'は大きくなり、それだけ有効に、V_Tのシフトを行なうことができる。しかしながら、打込みエネルギーが高すぎると、イオンはSi中で広がった分布となり、式(5.5)に従ったV_Tのシフトが得られなくなるばかりではなく、等価的に，基板全体の不純物濃度が変化したことになり、接合耐圧の低下、ドレイン容量の増大を招く結果となり、素子特性上好ましくない。

一方，打込みエネルギーが低過ぎると，図1-8の30keVの場合のように，半導体中に入る不純物の量が少なくなり，同一のΔV_Tを得るためのイオン注入量が増加することになる。

したがって、それぞれの酸化膜厚に対して最適な打込みエネルギーが存在することがわかる。そして、最適エネルギーにおいては、全体の打込み量N_0が少なく、かつイオンが、SiO_2-Siの界面近くに存在していることが望ましいから、以下，N_0と，イオンのSi中における平均深さ$\langle Z \rangle$（第2層中のイオン分布の重心）との積が最小になるように，打込みエネルギーを定める。

打込まれたイオンが100%活性化する場合，N_0'は、式(5.2)より次式で与えられる。

$$N_0' = N_0 \frac{1}{\sqrt{2\pi}\langle \Delta R_{p2} \rangle} \int_d^\infty e^{-\frac{(Z-\langle R_p' \rangle)^2}{2\langle \Delta R_{p2} \rangle^2}} dZ$$

$$= N_0 \, erfc\left(\frac{d-\langle R_p' \rangle}{\langle \Delta R_{p2} \rangle}\right) = N_0 \, erfc(D) \qquad (5.6)$$

ここで、 $$\mathrm{erfc}(D) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_D^\infty e^{-\frac{t^2}{2}} dt \qquad (5.7)$$

$$D = \frac{d - \langle R_p' \rangle}{\langle \Delta R_{p2} \rangle} = \frac{d - \langle R_{p1} \rangle}{\langle \Delta R_{p1} \rangle} \qquad (5.8)$$

つぎに、イオンのSi中の平均射影飛程は、

$$\langle Z \rangle = \frac{\frac{1}{\sqrt{2\pi}\langle \Delta R_{p2} \rangle} \int_d^\infty Z e^{-\frac{(Z - \langle R_p' \rangle)^2}{2\langle \Delta R_{p2} \rangle^2}} dZ}{\frac{1}{\sqrt{2\pi}\langle \Delta R_{p2} \rangle} \int_d^\infty e^{-\frac{(Z - \langle R_p' \rangle)^2}{2\langle \Delta R_{p2} \rangle^2}} dZ} - d$$

$$= \langle \Delta R_{p2} \rangle \left(\frac{e^{-\frac{D^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}\,\mathrm{erfc}(D)} - D \right) \qquad (5.9)$$

となるから、式 (5.6), (5.9) より、d および N_0' を一定として、$N_0' \cdot \langle Z \rangle$ が最小になるように打込みエネルギーを定めればよい。

この結果は、解析的に求めることはできないので、エネルギーを変化させながら、$\langle R_{p1} \rangle$, $\langle \Delta R_{p1} \rangle$, $\langle \Delta R_{p2} \rangle$ を計算し、その結果を $N_0' \langle Z \rangle$ に代入して、その値が最小となるEの値を求めた。

SiO_2-Si基板中に打込まれたBイオンについて、$N_0 \langle Z \rangle$ の値を、エネルギーおよび、SiO_2 層の厚み d の関数として示したのが、図5-10である。同図の破線は、SiO_2 中のBイオンの平均射影飛程 $\langle R_p \rangle$ が、膜厚 d と一致する条件を示している。同図に示す $N_0 \langle Z \rangle$ の極小値から、Bイオンの最適打込みエネルギーを求めると、酸化膜中のイオンの平均飛程が、酸化膜厚に一致するエネルギーよりも、約5keV高い値が得られる。

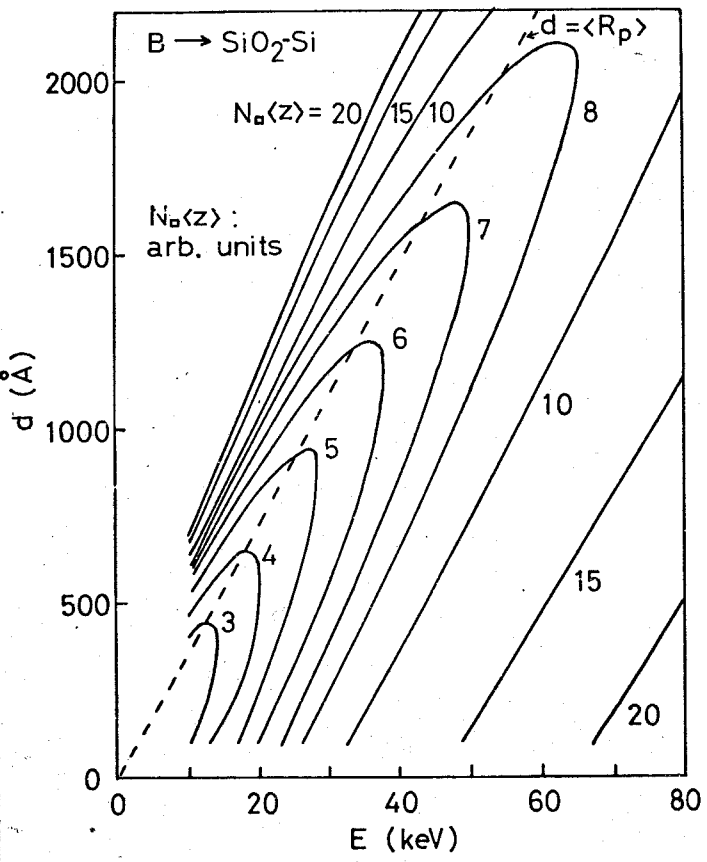


図5-10
MOSFETの閾値電圧制御のための最適打込みエネルギーを定める良さ指数 $N_D\langle Z\rangle$

つぎに，打込まれたイオンが100%活性化すると仮定して，SiO_2の膜厚と，ΔV_Tが与えられた場合に必要な打込み量をエネルギーをパラメターとして求める。

一定のエネルギーで打込んだ場合に，膜厚を薄くすると，式(5.5)のC_{ox}が増加するために，同じΔV_Tを得るための打込み量は増加することになる。一方，膜厚を厚くすると，半導体中に入るイオン数N_D'が急激に減少するから，膜厚を厚くした場合にも，同じΔV_Tを得るための打込み量は増加し，したがって，一定エネルギーで打込んだ場合には，同じΔV_Tを得る場合に，打込み量が最小となる厚みが存在することが予想される。

このような予想の下に，SiO_2-Si基板中に打込まれたBおよびPイオンについて，膜厚と，ΔV_Tおよび打込量N_Dとの関係を示したのが，図5-11，図5-12である。

同図は，打込みエネルギーをパラメターにして示したもので，エネルギーが一定の場合には，さきほどの予想どうり，SiO_2 層の厚みを適当に選ぶことにより，打込み量が最小となる。

また，同図の包絡線は，式(5.5)で，$N_D = N_D'$ と置いた結果を示しており，SiO_2 層を通して打込みイオンが総て Si 中に入る場合，すなわち，非常に高エネルギーでイオン注入を行なった場合に対応している。

図5-10から求まる膜厚一定の場合の最適打込み条件は，図5-11,12に破線で示してある。同図より明らかなように，この結果も，一定エネルギーに対して，$N_D/\Delta V_T$ が最小となる位置を，ほぼ通っている。

つぎに、同図で $d = \langle R_p \rangle$ と示されている実線は、SiO_2 中の平均射影飛程と，SiO_2 の厚みが一致した場合の値であり、この場合には、$N_D' = N_D/2$ の関係が成立つから、同じ ΔV_T を得るためには、非常に高エネルギーで打込んだ場合の2倍，最適エネルギーで打込んだ場合の約1.4倍の打込み量が必要となる。

一例として、ゲート酸化膜が1000Åの場合に、$\Delta V_T = 2V$ を達成するための最適打込み条件は、Bイオンではエネルギー34keV，打込み量 5.2×10^{11} 個/cm^2，Pイオンでは、エネルギー110keV 打込み量 5.2×10^{11} 個/cm^2 となる。

以上の検討は、膜厚があらかじめ定まっている場合に関したものであったが、熱酸化で製作される SiO_2 層の厚みは、成長条件により、多少のばらつきが生じる。この SiO_2 層の厚みのばらつきが、ΔV_T のばらつきとして、どの程度になるかを、最適打込み条件で行なった場合と、$d = \langle R_p \rangle$ の条件で行なった場合とについて考える。

一例として、900Åの SiO_2 層を付けた基板にBイオンを打込んで、$\Delta V_T = 2V$ を得る場合を考えると、最適打込み条件では、エネルギー30keV、

打込量 $5.9\times10^{11}\,cm^{-2}$ となり，$d=\langle R_p\rangle$ の条件では、エネルギー25keV 打込量 $8\times10^{11}\,cm^{-2}$ となる。

ここで，酸化膜厚の厚みに土 50Å のばらつきがあつたと仮定すると*、$N_0/\Delta V_T$ は最適条件の場合には 2.9 ～ 3.0 $\times10^{11}$ ($1/cm^2\cdot V$) の範囲で変化する。一方，$d=\langle R_p\rangle$ の場合の $N_0/\Delta V_T$ の変化は 3.8～4.3 $\times10^{11}$ ($1/cm^2\cdot V$) であるから、前記の打込み量における ΔV_T の変化は、最適条件の場合 1.96～2.03 (V)，$d=\langle R_p\rangle$ の場合には、1.86～2.10 (V) となる。

このように、最適打込み条件を用いた場合には、SiO_2 の厚みの変動に対する ΔV_T の変化を 1/3 以下にできることがわかつた。これは，最適打込み条件が，エネルギー一定の曲線の極小値付近を用いているためであり，この条件で打込みを行なうと，SiO_2 の厚みにばらつきがある場合にも，ΔV_T のばらつきが少なく，工業的にも最適な打込み条件ということができる。

* 文献 (37) より，ほぼ妥当な酸化膜厚のばらつきとしてこの値を用いた。

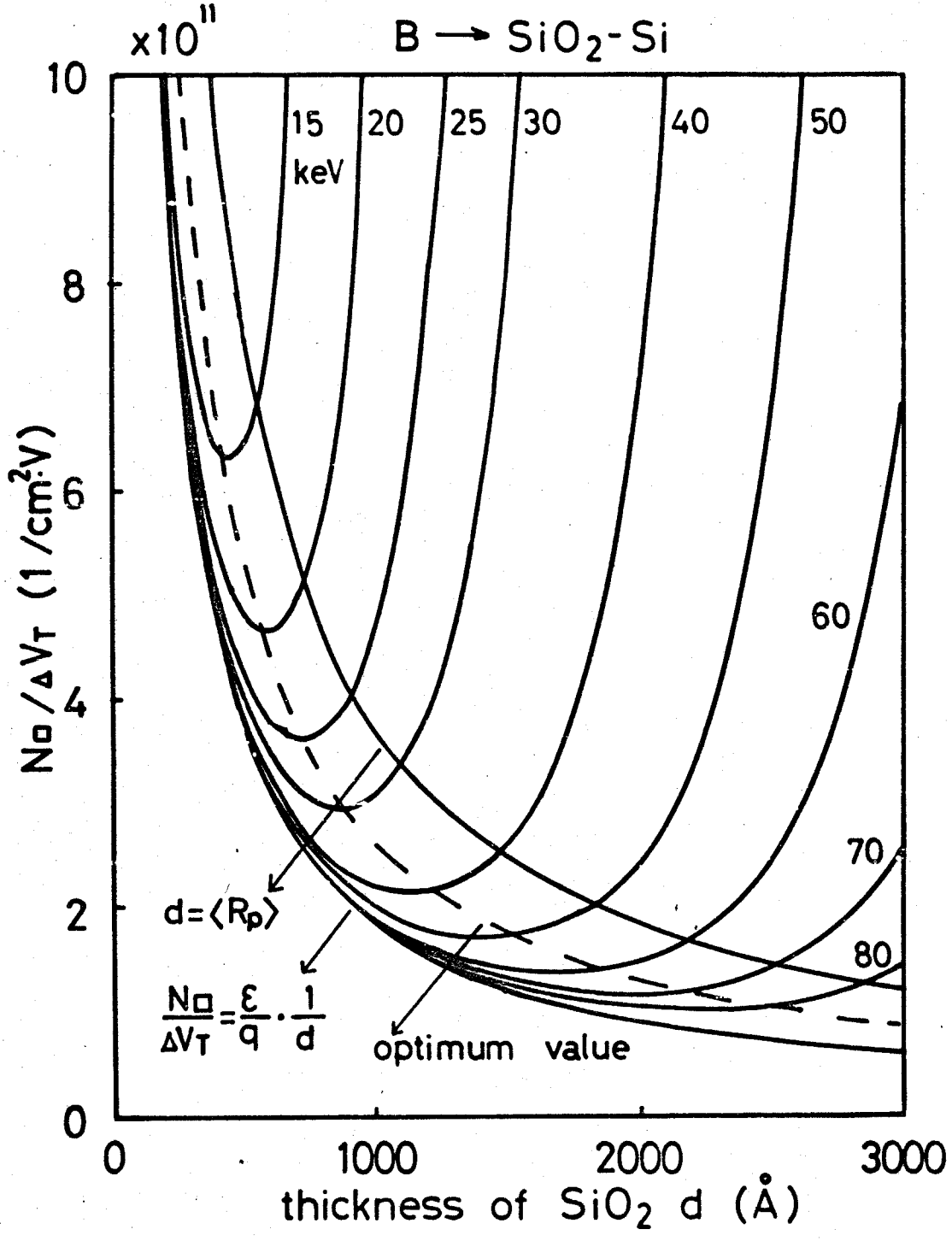


図5-11　MOSFETの閾値電圧制御のための最適打ち込み条件。(Bイオンを注入した場合。)

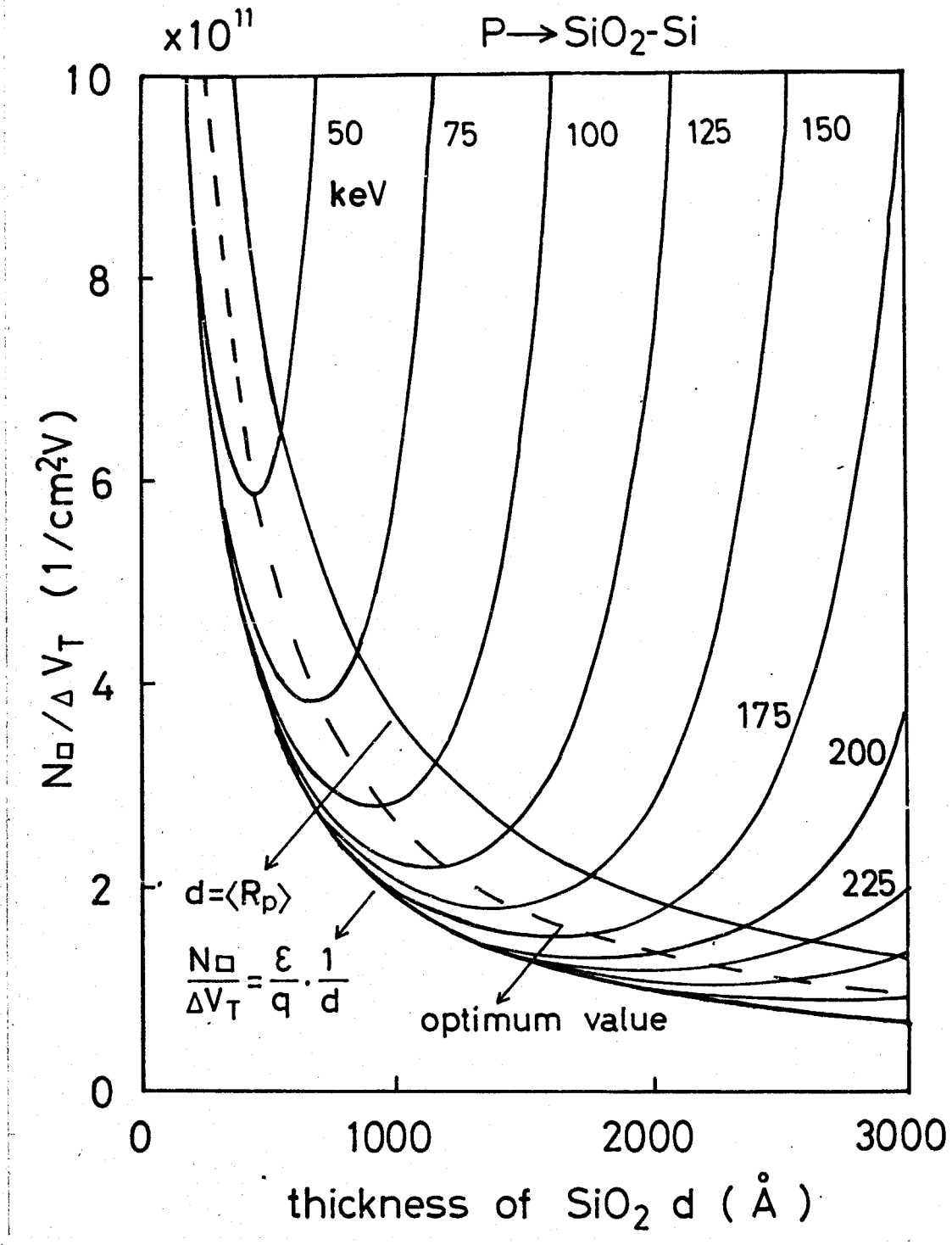


図5-12　MOSFETの閾値電圧制御のための最適打ち込み条件
(Pイオンを注入した場合.)

5.4 本章のまとめ

本章では、多層構造基板中の各層の境界で、イオンのエネルギー分布が連続であるという条件を用いて、各層のイオンの飛程分布を求めた。さらに、その物理的解釈に基づいて、適当な物質を組合せた多層構造基板中のイオンの射影飛程分布が、LSS理論から近似的に求められることを示し、その近似解析法を用いて、MOSFETのゲート閾値電圧制御のための最適打込み条件を求めた。

本章の解析で明らかになった点を以下に示す。

(1) 多層構造基板中のイオン濃度は、一般に層の境界面で段が付き、SiO_2-Si基板のように、第2層基板中の特性エネルギー損失の方が小さい場合には、第2層基板の表面濃度は、第1層の終端におけるイオン濃度より低くなる。一方、SiO_2-GaAs基板のように、第2層基板中の特性エネルギー損失の方が大きい場合には、第2層基板の表面濃度が高くなる。

(2) SiO_2のように、$\langle \Delta R_p \rangle / \langle R_p \rangle$の値が小さく、したがって、飛程分布の形状が相対的に鋭くなる基板を、GaAsのように$\langle \Delta R_p \rangle / \langle R_p \rangle$の値が大きく、飛程分布の形状がゆるやかな基板の表面に付けることにより、第2層基板中の最大イオン濃度を、第2層単独からなる基板に、直接イオン注入を行なう場合よりも大きくすることができる。

(3) Si, SiO_2, Al_2O_3およびSi_3N_4のように、$\langle \Delta R_p \rangle / \langle R_p \rangle$の値がほぼ等しい物質からなる多層構造基板中のイオン分布は、それぞれの物質に単独にイオン注入を行なったときに、LSS理論から求められる分

布を、境界面でつなぎ合せることにより近似的に表現できる。

(4) 結論(3)より、1000ÅのSiO_2層を通して、Si中に打込まれたイオンの分布は、760ÅのAl_2O_3, あるいは、820ÅのSi_3N_4層を通して、Si中に打込まれたイオンの分布と等しくなる。

(5) MOSFETのゲート閾値電圧制御のためにイオン注入を行なう場合には，酸化膜中の平均射影飛程と酸化膜厚とが一致するようなエネルギーで打込むよりは、それよりも若干高いエネルギーで、打込んだほうが、打込量と，Si中におけるイオンの平均深さとの積が小さくなり、閾値電圧制御という目的に適している。

また、この場合、酸化膜層のばらつきがあっても、閾値電圧の変動は小さく、工業的にも有用な打込み条件と考えられる。

(6) 最適打込みエネルギーは、SiO_2-Si基板にBイオンを打込む場合には，SiO_2中の平均射影飛程と、SiO_2膜厚が一致するエネルギーよりも、約5keV高いエネルギーであり、Pイオンを打込む場合は約20keV高いエネルギーである。また、Al_2O_3-Si, Si_3N_4-Si基板の場合にも、図5-11, 12の縦軸，横軸のスケールを変更するだけであるから、この結論は変らない。

第6章　格子欠陥分布に関する理論解析

前章までに行なった解析は、イオン注入により固体に導入された不純物原子の空間分布に関するものであった。この分布が、半導体素子製作上重要であることは言うまでもないが、イオン注入法により不純物原子を導入する場合には、格子欠陥の発生が避けられず、しかも、格子欠陥は、キャリアの逆アニール現象[20],[136],[140],[164]~[166]、あるいは、不純物原子の増速拡散現象[94],[143]~[145],[167]などと、密接に関連していることが知られている。

したがって、イオン注入時に発生する格子欠陥の空間分布を知ることは、欠陥の少ない打込み条件を確立するためばかりではなく、これらの現象の機構を明らかにするためにも重要と考えられる。

また、最近では、イオン注入の際に発生する格子欠陥を積極的に利用して、半導体素子を製作、改良しようとする試みがいくつかなされている。代表例として、格子欠陥によって生ずる高抵抗層を利用した素子の分離[83],[84],[91],[92]があげられるが、その他にもダイオード整流特性の改善[89],[90]、pn接合ダイオードの形成[86]~[88]、格子欠陥に伴なう増速拡散を用いたマイクロ波トランジスタの製作[94],[168]なども試みられており、格子欠陥分布を知ることは、素子製作上においても、イオンの飛程分布を知るのと同様に重要な問題となってきた。

格子欠陥分布に関する理論的考察は、従来、2つの方法によって行なわれてきた。すなわち、第1の方法はLindhardらの導いた積分方程式[169]を、モーメント展開によって解く方法[151],[170]であり、第2の方法はモンテ・カルロ法を用いてシュミレートする方法[171],[172]である。

しかしながら、格子欠陥分布は、一般にはがウス分布とは大きく異なった分布となるため、第1の方法を用いて格子欠陥分布の正確な形状を求める

ためには、高次のモーメントまでを計算する必要があり、現実的なポテンシャルを仮定して求めることは容易ではない。また、かつの方法により求まる欠陥分布は、ヒストグラムで表わされる分布であり、空間分解能を向上させるためには、多数回の計算が必要となる。

本章では、このような従来の方法とは異なった新しい方法で、格子欠陥を理論的に求めることを試みる。すなわち、本章の解析は、前章までの解析で求めた打込みイオンのエネルギー分布に基づいて、格子欠陥分布を求める方法であり、打込みイオンのエネルギー分布が、求まっている場合には、比較的短時間の計算で求めることができる。また、基板中の微少距離δRごとに欠陥密度を求めることができるため、欠陥分布の形状を正確に求めることができる。

なお、本章の解析を行なったのとほぼ同じ時期に、拡張されたLSS理論を用いて、格子欠陥の空間分布を求める方法がいくつか提案された。[161] [190], [160], [173], [174]

これらの方法に共通な基本概念は、イオンの飛程分布および、イオンが基板中で一定のエネルギーを持つときの空間分布を、それぞれがウス分布と仮定し、これより基板原子の変位に用いられるエネルギーの放出率を計算し、これが格子欠陥分布に対応すると考えるものである。したがって、イオンの飛程分布として、がウス分布を仮定することのできない多層構造基板中の欠陥分布を求める場合には、これらの方法は、取扱いが複雑となるものと考えられる。

これに対して、章.5に述べた解析法を用いると、多層構造基板中のイオンのエネルギー分布も、単一層からなる基板中のエネルギー分布と、全く同様に求めることができるから、本章に示す解析法では、多層構造基板中の格子欠陥分布も、単一層基板の場合と全く同様に求めることができる。

本章では、まず、第1節でイオンのエネルギー分布に基づいて、格子欠陥分布を求める方法の概略を示し、第2節では、その方法を単一層基板に適用して、格子欠陥分布の形状を求める。

また、第3節では、本方法を用いて多層構造基板中の欠陥分布を計算し、SiO_2-Si基板に重いイオンを打込んだ場合に、Si中にできる欠陥数は、Si基板に直接イオン注入を行ない、注入後にイオン数が等しくなるまで、表面を削った場合の欠陥数よりも少なくなることを明らかにする。

さらに、第4節では、第3節までの結果の物理的解釈に基づいて、基板が非晶質となる限界の注入量が、打込みイオンの質量によってどのように変化するかを定量的に検討する。

6.1 格子欠陥分布の導出法

本節では、まず、エネルギー分布 $F_m(E)$ を持つイオンが基板中を δR 進んだ場合に、基板原子核に与えるエネルギー分布を求める。基板原子核の得るエネルギーが、臨界変位エネルギー T_d よりも大きい場合には、その基板原子は、格子点を外れると考えることができるから、基板原子核のエネルギー分布より、基板原子の変位確率，および格子点を外れた基板原子のエネルギー分布を求めることができる。

さらに、格子点を外れた基板原子が、他の基板原子を変位させる確率を順次計算することにより、イオンが δR 進む間にできる全格子欠陥数を求めることができる。

格子欠陥の空間分布を求めるには、イオンのエネルギー分布 $F_m(E)$ を章4，章5で述べた方法によりまず求め、それぞれの位置におけるイオンのエネルギー分布から、上に述べた方法により、その位置における格子欠陥量を求めればよい。

6.1.1 解析の仮定

格子欠陥分布を求めるため、章4で、イオンのエネルギー分布を求めるために設けた仮定の他に、以下の仮定を置く。

仮定

(1) 基板原子核が臨界変位エネルギー T_d 以上のエネルギーを得た場合に、一つの格子欠陥ができる。

(2) T_d は、格子欠陥量に依存しない一定値とする。

(3) 格子欠陥数が基板原子数に等しくなった状態を非晶質状態と考える。

(4) 軌道電子に与えられたエネルギーは、格子欠陥の生成に寄与しない。

仮定(1)は、格子点を外れた基板原子が、別の格子位置に入って静止し、全体として、格子欠陥数が変化しないような状態が起る確率を無視することを意味している。このような、格子間原子と空孔との再結合過程は、基板温度が室温以上の場合には，無視することはできないが[175]，基板温度が十分低い場合には，ほぼ近似として無視できると考えられる。

事実、仮定(1)を用いて、第4節で計算した基板が非晶質となる限界注入量は、80°Kで行なわれた実験結果とは良く一致するが、室温で行なわれた実験結果よりも約1桁小さくなる。このことから、本節で求める格子欠陥分布は、定量的には、低温でイオン注入を行なった場合の結果を理論的に予測したものといえるが、格子欠陥分布の形状や、欠陥密度が最大となる位置に関しては、室温打込みの場合にも適用できると考えられる。

つぎに、仮定(2)は、格子欠陥量が多くなり、基板原子どうしを結んでいる手が、かなり切れている場合にも、平均的な臨界変位エネルギーが低下

しないということを仮定したものである。この仮定は、欠陥数が基板原子数と同程度になった場合には成立たないが、解析を簡単にするために、臨界変位エネルギーの非線形効果は考えないことにする。

また、現在のところ、非晶質の定義は、十分明確ではないが、本解析においては、仮定(3)により非晶質状態を定義する。

仮定(4)の妥当性は、原子核から電子に与えられたエネルギーが、再び原子核に戻された場合の最大エネルギーを求めることにより示される。相対論の効果を考慮に入れた場合、原子核と電子との衝突時における、最大伝達エネルギーは式(6.1)で与えられる。[110]

$$T_{max} = \frac{2(E+2m_0C_0^2)}{M_1C_0^2}E \qquad (6.1)$$

ここで、m_0, M_1は電子および原子核の質量、C_0は光速である。ただし、上式は$m_0 \ll M_1, E \ll M_1C_0^2$の仮定の下に解かれている。

いま、T_{max}が最も大きくなる場合として、水素原子核の場合を考え、入射エネルギーを500keVと仮定する。この場合、式(6.1)より、電子の運動エネルギーの最大値は、約1.6keVとなるから、再び式(6.1)を用いて、原子核に戻る最大エネルギーを求めると、約3.5eVとなる。基板を構成している原子核の質量は、水素原子核の質量よりも大きいから、電子から基板原子核に与えられるエネルギーは、さらに小さくなる。したがって、電子により基板原子核に与えられるエネルギーは、通常用いられているT_dの値(~25eV)に比べて、十分小さいといえ、イオン注入に用いられる通常のエネルギーでは、仮定(4)は十分満足されているということができる。

6.1.2 イオンが基板原子に与えるエネルギー分布

本項では、まず、一定エネルギーEで入射したイオンが、基板中の厚さδRの仮想的な薄層を通過した場合に、基板原子核に与えるエネルギー分布を求める。

薄層通過後のイオンのエネルギー分布は，式(4.7)で与えられる。したがって、E'とTnとの関係（$T_n = E - E'$）を用いて式(4.6)のηを次式のように書き直し、式(4.7)に代入すると、イオンが薄層を通過した場合に基板原子核に与えるエネルギー分布$G(T_n, E)dT_n$が求まる。

$$\eta = 1 - T_n / T_{n,max} \tag{6.2}$$

$$G(T_n, E)dT_n = -\frac{\sqrt{T_{n,max}}\, a^2}{2 C_E E b^2} f\left(C_E E \sqrt{\frac{T_n}{T_{n,max}}}\right) \frac{dT_n}{T_n^{3/2}} \tag{6.3}$$

ここで、$T_{n,max} = \gamma E$である。

式（6.3）は、基板原子核の得るエネルギー分布であり、エネルギーT_nが、臨界変位エネルギーT_dよりも小さい場合には、基板原子核は格子振動によりエネルギーを失う。一方，$T_n > T_d$の場合には、基板原子は，格子点を飛び出すことになるが、格子点を外れた原子は、一様に束縛エネルギーT_dを失っているから、格子点を外れた原子がT_nと$T_n + dT_n$の間のエネルギーを持つ確率は、

$$G(T_n + T_d, E)dT_n \tag{6.4}$$

となる。

また、基板原子を変位させる全衝突断面積は、$T_n \geq T_d$ となる面積で与えられるから、イオンが δR 進む間に、変位を受ける基板原子の個数 N_V は次式で与えられる。

$$N_V(E) = \frac{\pi l_d^2}{\pi b^2} = \frac{a^2}{b^2} \int_{C_E E \sqrt{\frac{T_d}{\gamma E}}}^{C_E E} \frac{f(x)}{x^2}\, dx \qquad (6.5)$$

ここで、右辺第2項は、式(4.5)を用いて求めた。なお、当然のことながら、式(6.4)を、0から $T_{n,max} - T_d$ まで積分した結果は、式(6.5)と一致する。

$$N_V(E) = \int_0^{T_{n,max}-T_d} -G(T_n + T_d, E)\, dT_n \qquad (6.6)$$

とくに、原子核間のポテンシャルが r^{-2} に比例し、$f = \lambda_2$ となる場合(式(2.12))には、式(6.3), (6.5)は簡単に次式となる。

$$G(T_n, E)\, dT_n = -\frac{\sqrt{\gamma}\, a^2 \lambda_2}{2 C_E b^2 \sqrt{E}} \cdot \frac{dT_n}{T_n^{3/2}} \qquad (6.7)$$

$$N_V(E) = \frac{a^2 \lambda_2}{C_E E b^2} \left(\sqrt{\frac{\gamma E}{T_d}} - 1 \right) \qquad (6.8)$$

式(6.8)より、$N_V(E)$ が最大になるのは、$E = 4T_d/\gamma$ の場合であることがわかる。また、格子点を外れた基板原子の平均エネルギー $\langle T_n \rangle_V$ は次式で与えられる。

$$\langle T_n \rangle_V = \frac{\int_0^{T_{n,max}-T_d} T_n\, G(T_n + T_d, E)\, dT_n}{\int_0^{T_{n,max}-T_d} G(T_n + T_d, E)\, dT_n} = T_d \left(\sqrt{\frac{\gamma E}{T_d}} - 1 \right) \qquad (6.9)$$

イオンの入射エネルギーEが1keVの場合，式(6.9)の右辺第1項は，約6となり，第2項は，ほぼ無視できるから，Eが1keV以上の場合には，格子点を飛び出す基板原子の平均エネルギーは，$\sqrt{E}$に比例することになる。

$N_V(E)$のエネルギー依存性を図6-1に示す。

同図は，Si基板に打込まれたB，P，およびSbイオンにより作られる格子欠陥密度のエネルギー依存性を示したもので、式(6.8)のT_dを25eVと仮定して求めたものである。同図の縦軸は単位長さ進んだ場合の値（$n_V(E) = N_V(E)/\delta R$）を示している。

同図より，格子欠陥は、イオンのエネルギーが100～200eVの時最も多くでき、イオンのエネルギーが増加するにしたがって減少すること，および，$n_V(E)$は，次式のように変形できるから，最大欠陥密度は，イオンの平均飛程に，ほぼ逆比例し，重いイオンほど，欠陥密度が大きいことがわかる。

$$n_V(E) = \frac{N_V(E)}{\delta R} = \frac{S_n^0 N}{\gamma E}\left(\sqrt{\frac{\gamma E}{T_d}} - 1\right) = \frac{1}{\gamma \langle R(E)\rangle}\left(\sqrt{\frac{\gamma E}{T_d}} - 1\right) \quad (6.10)$$

$$n_V(4T_d/\gamma) = \frac{1}{\gamma \langle R(4T_d/\gamma)\rangle} \quad \text{（最大欠陥密度）} \quad (6.11)$$

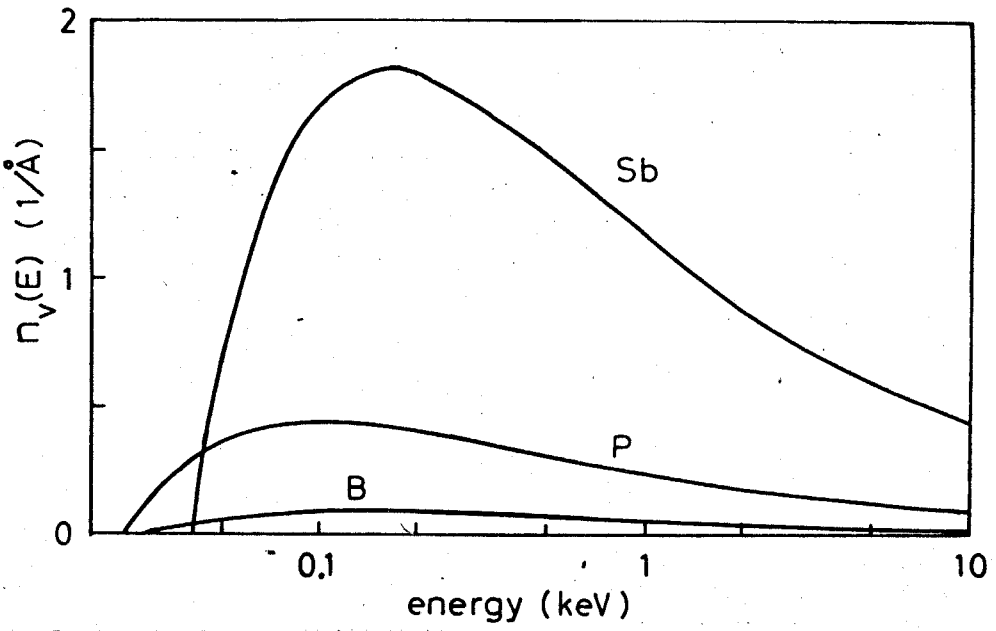


図6-1　下図のイオンにより Si基板中に作られる格子欠陥密度

以上の解析は、入射イオンのエネルギーが、一定値Eと仮定されているので、基板表面において発生する格子欠陥数、および、格子点を外れたイオンのエネルギー分布に対応している。イオンが基板中を、進んだ場合には、厚さδRの薄層に入射する前のイオンのエネルギーは、すでに広がりをもっている。このエネルギー分布を$F_m(E)$とした場合の、格子欠陥数N'_{Vm}および、欠陥のエネルギー分布$G'_m(T_n)$は、式(4.11)と同様に次式で与えられる。

$$N'_{Vm} = \int F_m(E)\, N_V(E)\, dE \qquad (6.12)$$

$$G'_m(T_n) = \int - F_m(E)\, G(T_n + T_d, E)\, dE \qquad (6.13)$$

ここで、積分は、$F_m(E)$の広がり全体にわたって行なう。式(6.12)および(6.13)より、エネルギー分布$F_m(E)$を持つ入射イオンがδR進む間に直接作る格子欠陥数、および、格子点を外れた原子のエネルギー分布が求まる。

6.1.3. 格子点を外れた原子により作られる欠陥

前項の解析は、入射イオンにより直接作られる欠陥数を求めたものであったが、格子点を外れた基板原子が、他の基板原子と衝突して新らたに作る格子欠陥も、無視することはできない。* 本項では、このような、格子点を外れた基板原子により間接的に作られる欠陥について考察を行なう。

式(6.9)を用いると、100keVのイオンにより、格子位置を跳ねとばされた基板原子の平均エネルギーは、約 1.5keV となる。したがって、格子位置を外れた原子が、基板中を長い距離進む確率は少なく、大部分の原子は、イオンによって跳ねとばされた位置付近に、新しい欠陥を作るということができる。

このことにより、以下の解析においては、イオンが厚さ δR の薄層内を通過したときにできる欠陥は、イオンにより直接作られる欠陥ばかりではなく、格子点を外れた基板原子によってできる2次欠陥**をも含めて、すべての欠陥が、δR の薄層内にできると仮定する。

入射イオンにより格子点から跳ねとばされた、基板原子のエネルギー分布(式(6.13))を改めて、$G'_m(E)$ と書くと、この原子によってできる2次欠陥数 N^2_{dm} および、そのエネルギー分布 $G^2_m(T_n)$ は次式で与えられる。

$$N^2_{vm} = \int G'_m(E)\, N_v(E)\, dE \qquad (6.14)$$

$$G^2_m(T_n) = \int -G'_m(E)\, G(T_n + T_d, E)\, dE \qquad (6.15)$$

ここで、積分は $G'_m(E)$ の全エネルギー範囲にわたって行なう。

---

* 次章で示すように、格子点を外れた原子により作られる2次欠陥は、入射イオンにより、直接作りだされる欠陥よりも約10倍多い。

** 本章では、格子点を外れた基板原子により間接的に作られる欠陥を2次欠陥と呼ぶことにする。

以下、全く同様にして、基板原子どうしの衝突により、厚さδRの薄層内にできる欠陥の個数と、そのエネルギー分布を順次求めることができる。また、薄層内にできる全欠陥数N_{vm}は、各々の衝突の際にできる欠陥数の和となるから次式で与えられる。

$$N_{vm} = \sum_{k=1}^{\infty} N_{vm}^{k} \qquad (6.16)$$

基板中のイオンのエネルギー分布および、格子欠陥分布を求めるフローチャートを図 6-2 に示す。

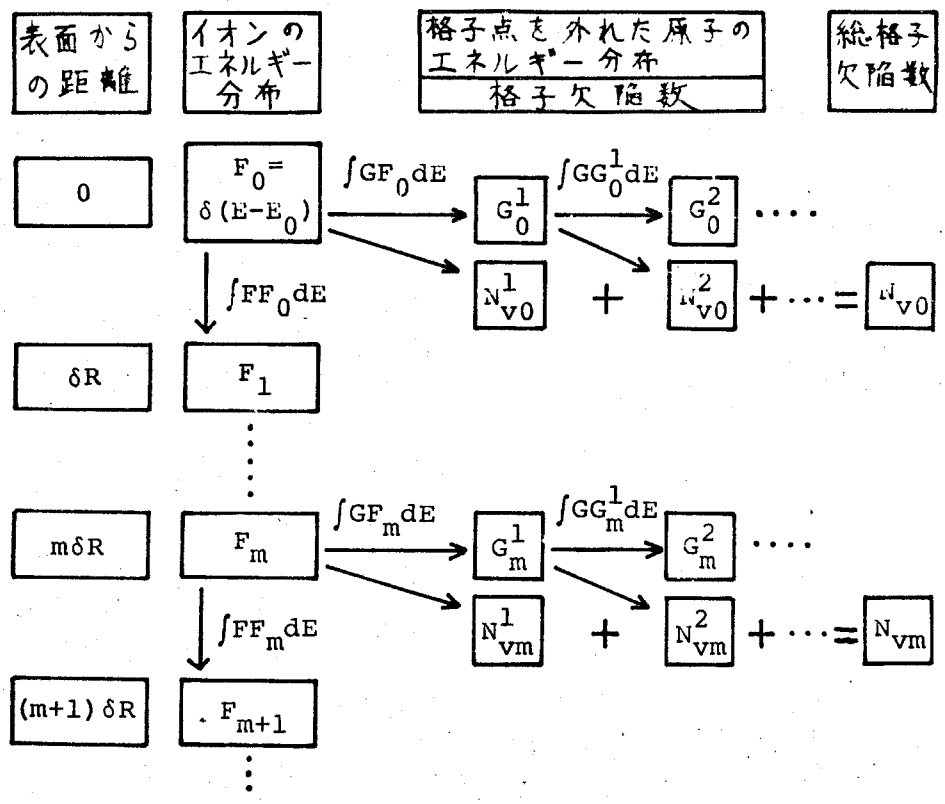


図 6-2 基板中のイオンのエネルギー分布、および格子欠陥分布を求めるフローチャート

6.2 単一層基板中の格子欠陥分布

本節では、前節の解析に基づいて、単一層基板中の格子欠陥分布を計算し、実験結果との対応を試みる。

6.2.1 計算例

計算の一例として、50keVでSi基板に打込まれたSbイオンによりできる格子欠陥分布を考える。ここで、欠陥分布の計算は、4.1.1 および 6.1.1 で述べた解析上の仮定のほか、以下に示す計算上の仮定を置いて行なう。

仮定

(a) 原子核間のポテンシャルは r^{-2} ポテンシャルとする。

(b) Sbイオンは Si 基板に比べて十分重いので、軌道電子によるエネルギー損失を無視する。

(c) 基板中のイオンのエネルギー分布を求めるための、仮想的な薄層の厚み δR を 13.6Å とする。

(d) 基板原子の変位エネルギー T_d を 25eV* とする。

この場合の、イオンの基板中における エネルギー分布、および、飛程分布は、図 4-5, 図 4-7 に示されているから、Sbイオンにより格子点から跳ね飛ばされる基板原子のエネルギー分布は、図 4-5 の結果を式 (6.13) に代入することにより求めることができる。

---

* Si に対する T_d の値は 14eV[176] 15.8eV[177] などの報告もある。ここでは、文献 (159) および (178) の結果を用いた。

基板中を200Å進んだSbイオン（R＝200Å）により，格子点を跳ねとばされた基板原子のエネルギー分布，および，式（6.15）から求めた，2次的な衝突により，格子点から外れた基板原子のエネルギー分布を図6-3に示す。（同図の縦軸は単位距離当りの値 $g_m^k(T_n)=G_m^k(T_n)/\delta R$ を示している。）

同図より，イオンにより直接格子点を跳ねとばされた原子の平均エネルギーは，比較的大きいが，格子点から外れた基板原子により，2次的に作られる欠陥の平均エネルギーは，数十eV程度になることがわかる。このことからも，格子点を外れた基板原子により間接的に作られる2次欠陥も，総て厚さδRの薄層内にできるという仮定の妥当性が明らかとなる。

つぎに，図6-4は，イオンにより直接作られる欠陥数，および，その後の基板原子どうしの衝突によってできる欠陥数を，示したものである。横軸の $k=1$ はイオンにより直接作られる欠陥数を示したものであり，$k\geq 2$ は，基板原子どうしの衝突によりできる，欠陥を表わしている。横軸が値を持つのは，それぞれの整数値に対応する位置だけであるが，同図は連続量として示してある。

同図より，欠陥が最も多くできるのは，$k=3$ の場合であり，$k=10$ 程度まで考慮すれば，格子欠陥の総数をほぼ正しく求めることができると，結論できる。

同図で，$k=3$ の場合に欠陥数が最も多くなるのは，欠陥の増倍率を考えることにより理解できる。すなわち，$k=1$，および，2の場合には，1個のイオンあるいは，格子点を外れた基板原子が，δR進む間に1個以上の欠陥を作るが，$k\geq 3$ の場合には，1個の基板原子は，1個以下の欠陥しか作らないので，欠陥数は $k=3$ の場合に最大となる。

つぎに，$k=10$ までを考慮して求めた格子欠陥分布を図6-5に示す。同図には，Sbイオンにより直接作られる欠陥分布（図6-4の $k=1$ に対応する値），および，Sbイオンの飛程分布を同時に示してある。同図より，

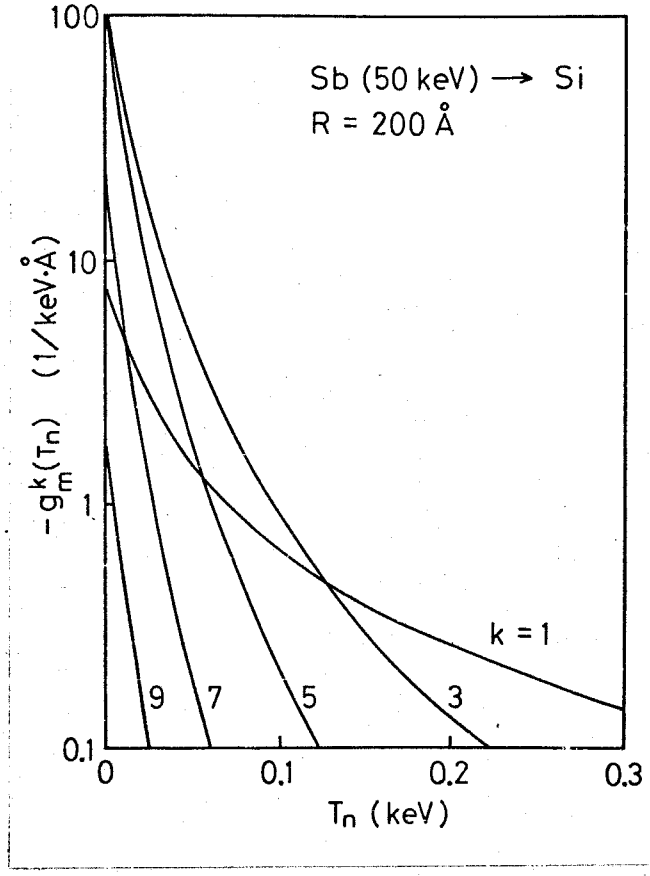


図6-3
Sbイオンにより格子点を跳ね飛ばされたSi原子のエネルギー分布。kは衝突の回数を示している。
(r^{-2} pot.)

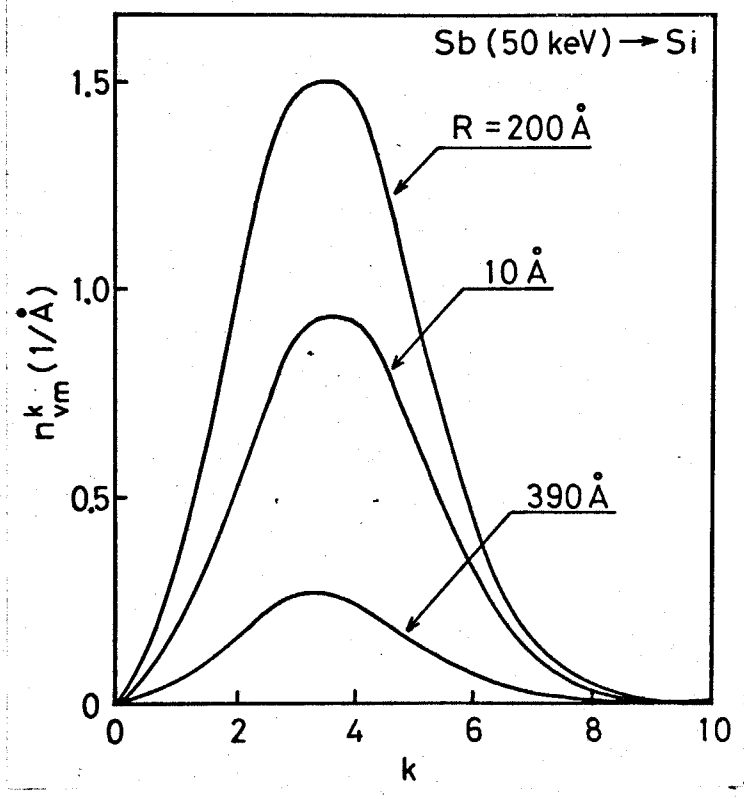


図6-4
Sbイオンにより，直接および間接的に作られる格子欠陥密度
(r^{-2} pot.)

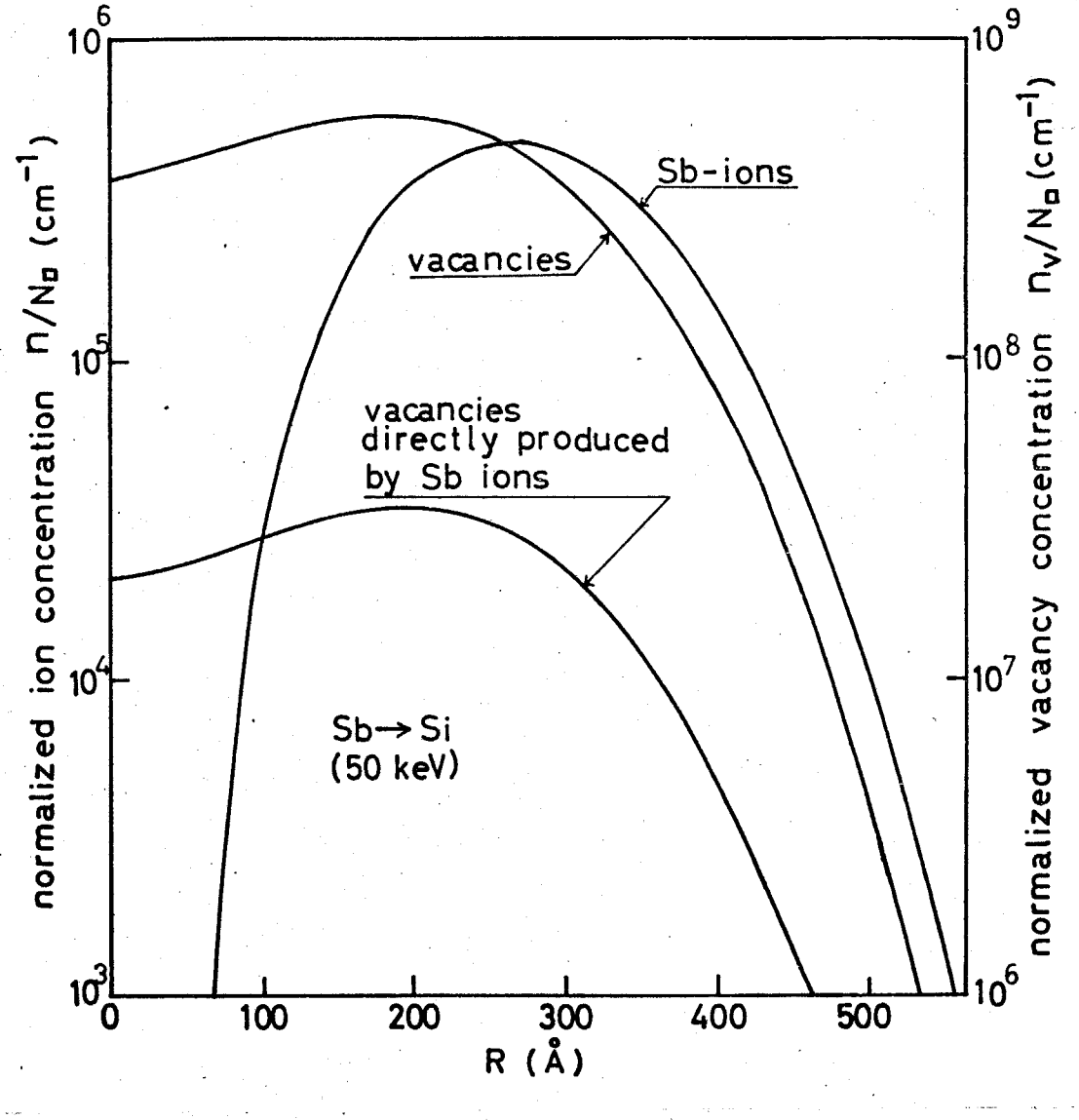


図 6-5　50 keV Sb イオンによる Si 基板中の格子欠陥分布（r^{-2} pot.）

50 keV の Sb イオンにより Si 基板中に作られた格子欠陥分布に関して、以下の結論が得られる。

結論

(1) 格子欠陥密度は、イオンの平均飛程 $\langle R \rangle$ の約 2/3 の距離において最大となる。そして、表面から平均飛程までの欠陥密度は、ほぼ一定であるが、平均飛程よりも深い位置では、欠陥はガウス分布的に減少する。

(2) Sb イオンによって、直接作りだされる格子欠陥数は、1個のイオンにつき約100個であるが、格子点を外れた Si 原子が二次的に作り出す欠陥数を合わせた全体の欠陥数は、イオン1個につき1700個となる。

(3) 1700個の基板原子を変位させるためには、少なくとも $0.025 \times 1700 = 42.5$ keV のエネルギーが必要である。したがって、残りの 15% のエネルギーは、基板原子の格子振動という形で熱エネルギーに、変換されたことになる。

(4) 6.1.1. で述べた仮定(3)にしたがって、基板が非晶質となる Sb イオンの限界の注入量を求めると、8.7×10^{13} 個/cm^2 となる。

(5) イオンにより、直接作られた欠陥分布を、17倍(1次欠陥数と全欠陥数との比)し、総欠陥分布と比較したのが図 6-6 である。同図より、両者の形状は極めて良く一致しているということができる。このことより、単一層からなる基板中の格子欠陥分布の形状のみを求める場合には、計算の容易な、イオンにより直接作られる格子欠陥分布のみを、求めれば近似的に表現できると結論できる。

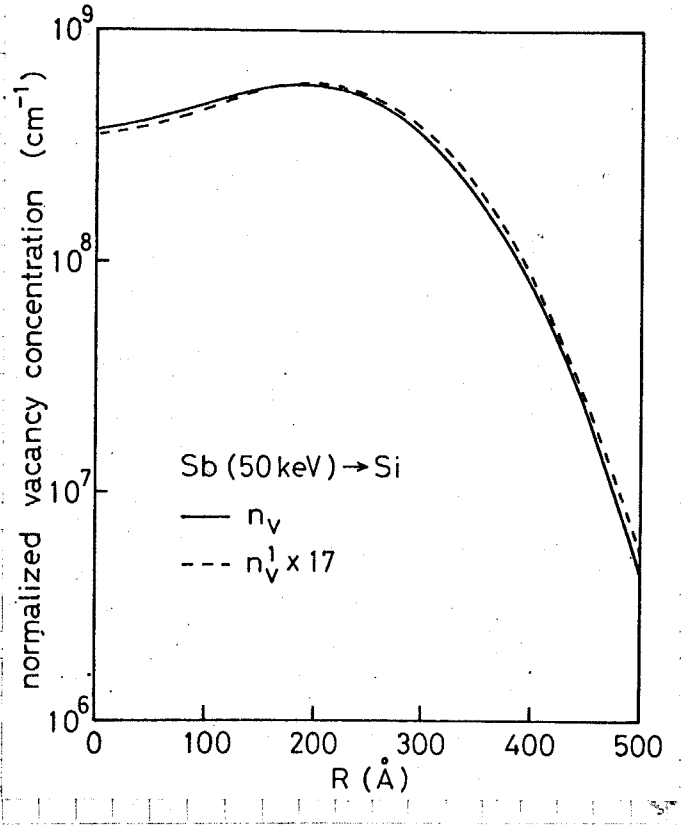


図6-6
Sbイオンにより直接作られる格子欠陥分布と，総欠陥分布との比較。
(r^{-2} pot.)

以上の結論は、原子核間のポテンシャルとしてr^{-2}ポテンシャルを仮定して求めたものであり、また、T_dの値も十分良く分っているとはいえないので，定量的には不十分なところもあると考えられるが，重いイオンを打込んだ場合にできる、格子欠陥分布の定性的傾向を、十分良く表わしていると考えられる。実験結果との定量的対応を次項に示す。

6.2.2 実験結果との対応

本項では、前項で求めた計算結果を、チャンネリング効果を用いたHeイオンの後方散乱法*で求めた実験結果と対応させ、定量的検討を行なう。

40keVでSi中に打込まれたSbイオンによりできる格子欠陥は、イオン1個当り3000～3300個であることが、この実験より求まっている。[15),(18)] 打込みイオンが50keVの場合には、上記の値は、約2割大きくなると考えられ、結論(2)で理論的に求めた値の約2倍となる。

しかしながら、チャンネリング法によって検出される欠陥には、それをかこむ変形領域が含まれてしまうために、この測定法は、欠陥数を約2倍多く見積りすぎるという報告[179]と考え合わせると、理論的に求まる欠陥数は、定量的に実験結果と、かなり良く一致しているということができる。

つぎに、結論(4)で求めた、基板が非晶質となる限界注入量について検討を行なう。チャンネリング法で求まる40keV～100keV SbのSi中における限界注入量は、$5\sim8\times10^{13}$個/cm^2である。[15),(180)] 6.4で述べるように、この値は、打込みエネルギーに、それほど大きく依存しないから、この値は、そのまま50keV Sbの実験結果と考えることができる。

上で述べたように、チャンネリング法で見積る欠陥が、実際の欠陥の2倍と仮定した場合の、限界注入量は$1\sim1.6\times10^{14}cm^{-2}$となり、本解析法により求めた$8.7\times10^{13}cm^{-2}$という値とほぼ一致していることがわかる。

最後に、チャンネリング効果を用いて、Bøghらにより求められた50keV Sbによる Si中の欠陥分布[181]を理論と比較した結果を図6-7に示す。

Sbイオンの打込み量から求めた理論値は、先に述べた理由により、実験値の約半分になるので、同図には、ピーク値で規格化した結果を示して

---

* チャンネリング効果を用いたHeイオンの後方散乱法に関する説明は、章8で述べる。

る。チャンネリング法によつて、欠陥分布を求める場合には、基板の深い部分の欠陥分布の誤差が大きくなるという報告[182],[183]を考え合わせると、理論に求まる欠陥分布は、実験値とかなり良く合っているということができる。

以上の検討より、本解析法により求まる格子欠陥分布は、定量的にも、実験結果とかなり良く一致すると結論できる。

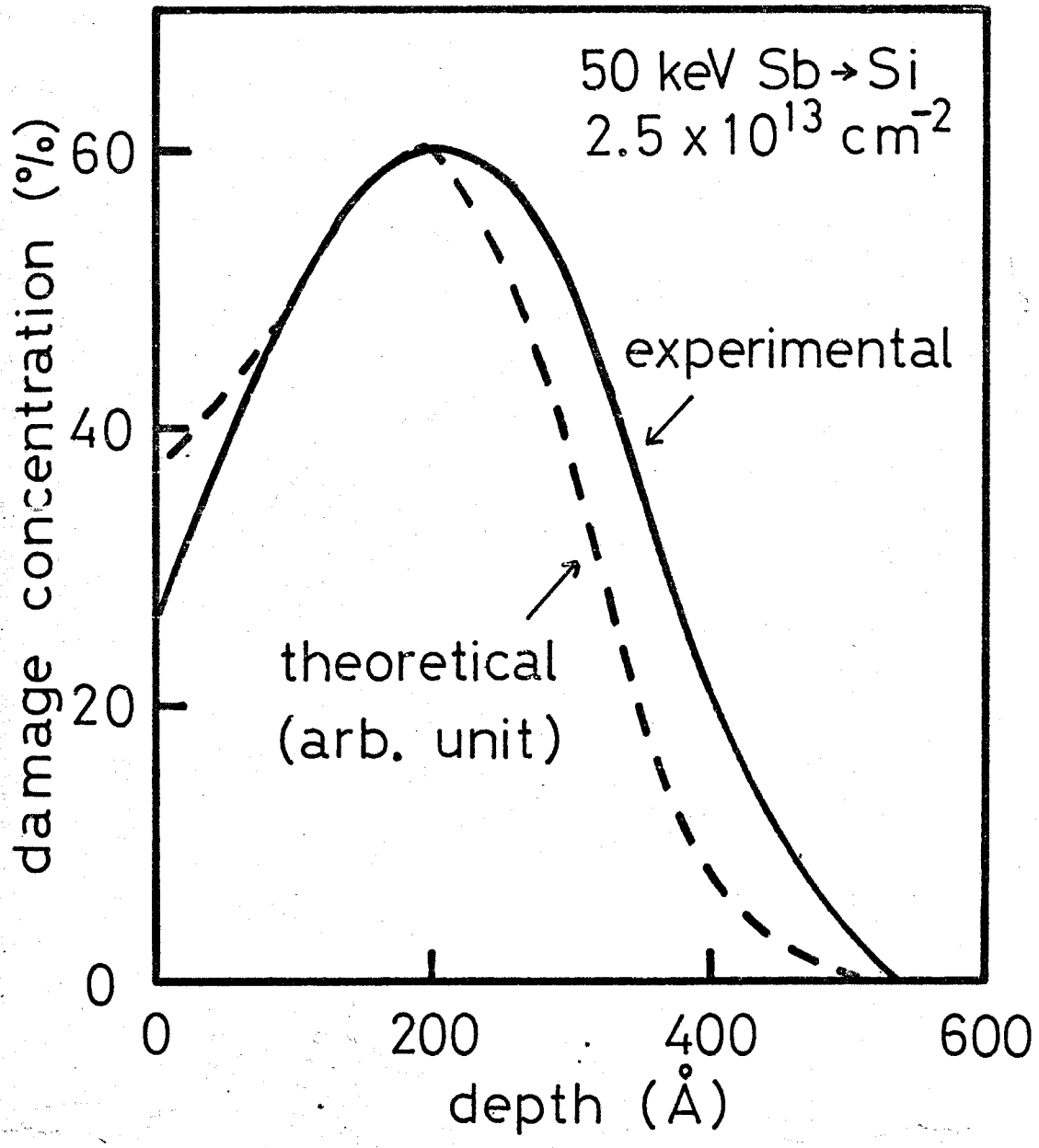


図 6 - 7　格子欠陥分布の理論値と実験値との比較
実験値は Bøgh らによる。[191]

6.3 多層構造基板中の格子欠陥分布

本節では、半導体表面上に、酸化膜層などのついた、多層構造基板にイオン注入をした場合にできる格子欠陥分布について考察を行なう。

多層構造基板に打込まれたイオンのエネルギー分布は章5に示した解析法により求まる。したがって、前節の方法と組合わせることにより、多層構造基板中の格子欠陥分布を求めることができる。

イオン注入により、酸化膜中にできる格子欠陥に関しては、SiO_2について、比較的良く研究されており、格子欠陥による光の屈折率変化,[81],[82] エッチング速度の増加,[184] もれ電流の増加[184] などが報告されている。

このように、非晶質と考えられている物質においても、格子欠陥により、その物理的および化学的性質が変化することがわかる。この原因は、非晶質物質といえども、数原子の大きさの範囲では、原子ず互いに結びついており、その結合が切れることによって、性質が変化すると考えられる。このことから、非晶質物質中においても、結晶中と同様に格子欠陥分布を求めることは意義があると言える。

以下、多層構造基板中の格子欠陥分布の一例として、50keVのSbイオンにより作られるSiO_2-Si基板中の格子欠陥分布を考える。本節においても、原子核間の相互作用ポテンシャルとして、r^{-2}ポテンシャルを仮定するが、軌道電子によるエネルギー損失は考慮に入れて解析を行なう。*

Si基板中の格子欠陥分布は、2層構造基板中のイオンのエネルギー分布を求める章5の方法と、前節の解析法を組合せて求めることができる。また、SiO_2中のSbイオンのエネルギー分布は、4.3で求めた化合物基板中のエネルギー分布を求める方法により、求めることができるから、その

---

* 50keVでSbイオンをSi基板に打込む場合には、E_cの値より、電子阻止能は無視できると考えて、前節までの議論を進めた。本節では、この予想を確かめるため、電子阻止能を考慮に入れて解析を行なった。結果として、このような打込み条件の場合には、電子阻止能の影響は無視できることが確かめられた。

エネルギー分布を用いて、SiO_2中の格子欠陥分布は、図6-8に示す、フローチャートに従って求めることができる。

ただし、SiO_2中のSiおよびOの臨界変位エネルギーTdは、現在のところ、十分明らかではないので、固体について一般的にいわれている値である25eV[159]を用いた。

このように、SiO_2中と、Si中とで、同じTdを用いることは、SiO_2中と、Si中とにできる格子欠陥量を比較する場合には、やや近似が荒いと考えられるが、

1) SiO_2中にできる格子欠陥分布の形状を求める場合、および

2) SiO_2層の厚みを変えることにより、Si中にできる格子欠陥量がどのように変化するかを調べる場合には、Tdの絶対値は直接影響を与えず、ほぼ妥当な議論ができるものと考えられる。

図6-9は、図6-8に示す方法を用いて計算したSiO_2基板中のSbイオンによる、格子欠陥分布である。

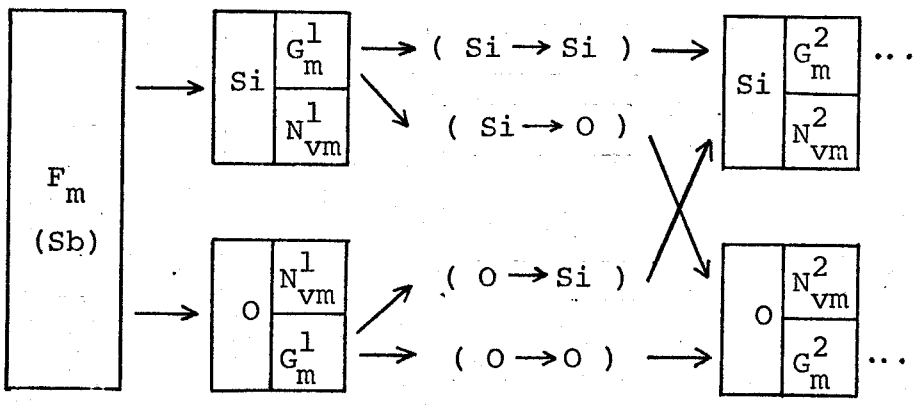


図6-8 化合物基板中の格子欠陥分布を求めるフローチャート

同図の計算は$\delta R = 5\text{Å}$を仮定してある。同図には、同時に計算したSbイオンの飛程分布が示してあり、LSS理論から求まるガウス分布との一致は良いといえる。

同図と、図6-5で示した、Si基板中のSbイオンによる、格子欠陥分布とを比較すると、定性的には良く一致した傾向を示すが、SiO_2の方が、最大欠陥密度を示す深さが、若干表面側に寄り、その位置は、Siの場合の$2\langle R\rangle/3$よりも、$\langle R\rangle/2$に近くなっている。

イオンにより直接作られる1次欠陥数と、全欠陥数との比は、Si基板の場合1/7であったが、SiO_2基板の場合には、8.3となり、SiO_2の場合には、2次欠陥数が少なくなる。これは、SiO_2基板の場合には、イオンによりSi原子と、O原子が格子点から外れるが、その内のO原子の作る2次欠陥数が少ないために、総欠陥数が少なくなると解釈できる。ただし、この結論は、Si原子のT_dと、O原子のT_dが等しいと仮定して求めたものであるから、両原子のT_dが大きく異なっている場合には、当てはまらない。

なお、T_dとして25eVを仮定した場合には、SiO_2基板中の最大欠陥密度が、原子密度に等しくなる打込量は、2×10^{14}個/cm^2となり、Si中の値よりも約2.3倍大きくなる。

つぎに、200ÅのSiO_2層がついたSi基板中に打込まれたSbイオンによりできる格子欠陥分布および、Sbイオンの飛程分布を図6-10に示す。

Sbイオンの飛程分布に、境界面で段がつくことは、章5で方でに述べたが、同図より格子欠陥分布にも、同様な段が付くことがわかる。そして、Sbイオンにより直接作られる格子欠陥密度を比較すると、式(6.10)からも明らかなように、イオンの平均飛程の短かいSiO_2中の方が大きい。一方、総欠陥数を比較すると、一次欠陥とは逆に、Si基板中の方が大きくなっており、この原因としてはO原子の作る格子欠陥数が少ないためと考えられる。

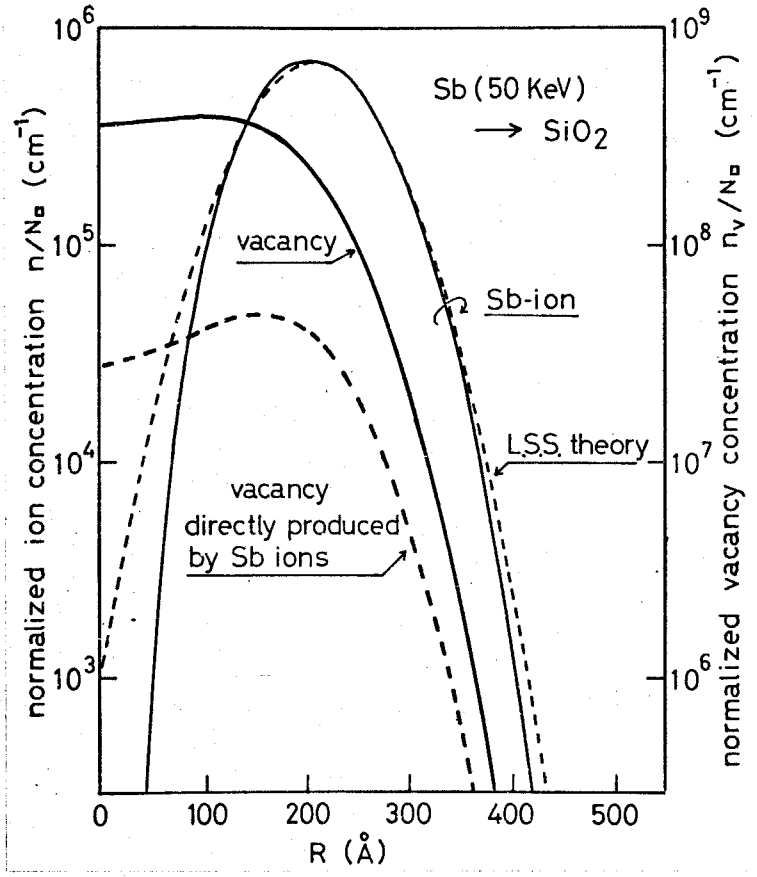


図 6-9
50 keV Sbイオン
による SiO_2 基板
中の格子欠陥分布
(r^{-2} pot.)

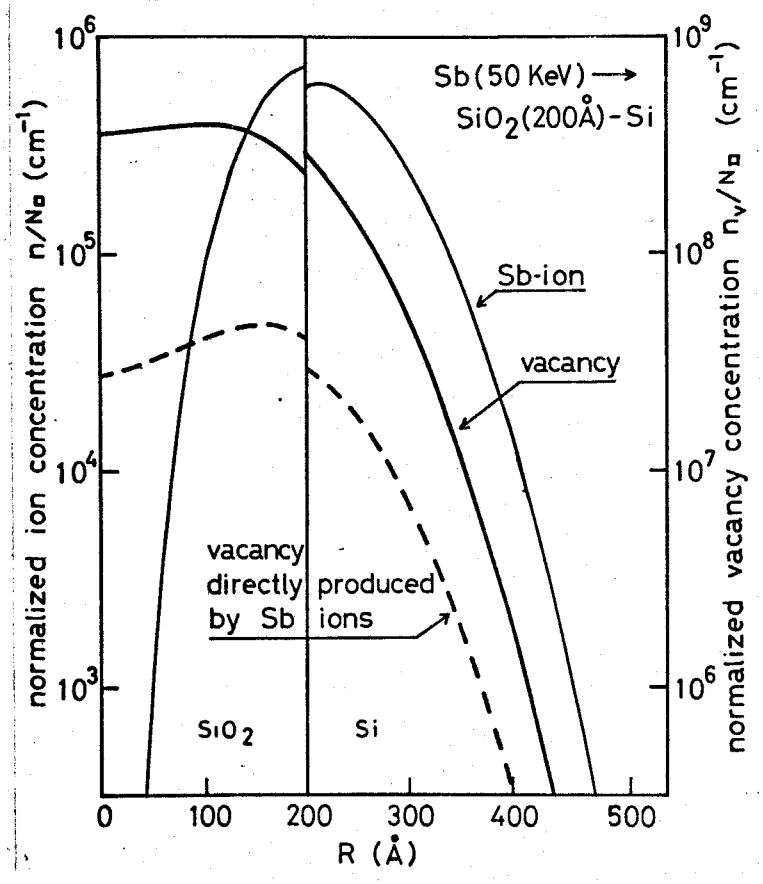


図 6-10
50 keV Sb イオン
による SiO_2-Si 基板
中の格子欠陥分布
(r^{-2} pot.)

このために，多層構造基板中の格子欠陥分布は，必ずしもイオンが直接作る欠陥分布には比例せず，したがって，図6-6に示す方法によっては，格子欠陥分布の形状を求めることができない。

また，イオンが直接作る欠陥分布の形状は，イオンのエネルギー放出率*の形状と比較的良く一致しているから，エネルギー放出率の形状を，格子欠陥分布の形状とみなす解析法(160),(161),(174),(190)によっては，多層構造基板中の格子欠陥分布の形状を正確に表わすことはできないといえる。

格子欠陥の発生が少ない打込み基板の選定

図6-10に示すような多層構造基板にイオン注入を行なった場合には，注入イオン分布は，図5-3に示すように，第1層を付けずに，第2層に直接イオン注入を行なった後に，表面をエッチングした場合と若干異なってくる。したがって，発生する格子欠陥分布も変化することが予想され，表面層の厚さなどを適当に選ぶことにより，第2層中で発生する格子欠陥量が，表面層を付けずにイオン注入を行なう場合よりも減少する可能性がある。ここでは，このような可能性について以下検討を行なう。

図6-10と同様な計算を，SiO_2層の厚さを変えて行ない，Si中に達するイオン数N_0'と，Si中にできる総欠陥数N_Vを示したのが，図6-11である。また，同図にはSiO_2を付けずに，直接Si基板にイオン注入した後に、イオン数がN_0'になるまで表面からエッチングした場合の欠陥数をN_V^*とし，N_V/N_V^*を同時に示してある。

この比が1の場合には、SiO_2層を付けてイオン注入を行ない、打込み後にSiO_2層を除去した場合と，SiO_2層を付けずに注入を行ない、打込み後に表面を削った場合とで、格子欠陥数が等しいことを示しており、また，この比が1よりも小さければ、前者の方法のほうが、格子欠陥の発生という観

*イオンのエネルギー放出率は，イオンにより格子点を外れた基板原子の個数と，格子点を外れた基板原子の平均エネルギーとの積で与えられる。

表からは優れていることを示している。

同図より、100Å以上のSiO_2層をつけた場合には、この比が約0.9となり、SiO_2層を付けてイオン注入することにより、同じ量のイオンの打込みに対して、格子欠陥量を約10%減らせることがわかる。

この格子欠陥量の違いは、Si中のイオン分布の形状の違いで説明することができる。すなわち、SiO_2を付けた場合と、付けない場合とで、Si中に存在するイオン数は一致しているが、イオン分布の形状は、図5-3(a), (b)に示すように、SiO_2を通してSi基板に打込んだ場合の方が、Si中に深く入るイオン数が少なく、境界面付近のイオン濃度が約10%高くなっている。これは、SiO_2層を通した場合には、境界面において、イオンの平均エネルギーが、SiO_2を付けずに打込んだものより低いことを意味しており、両者のイオン数は一定であるから、Si中で消費される全エネルギーは、SiO_2を付けた場合のほうが少なく、したがって、格子欠陥数も減少すると解釈できる。

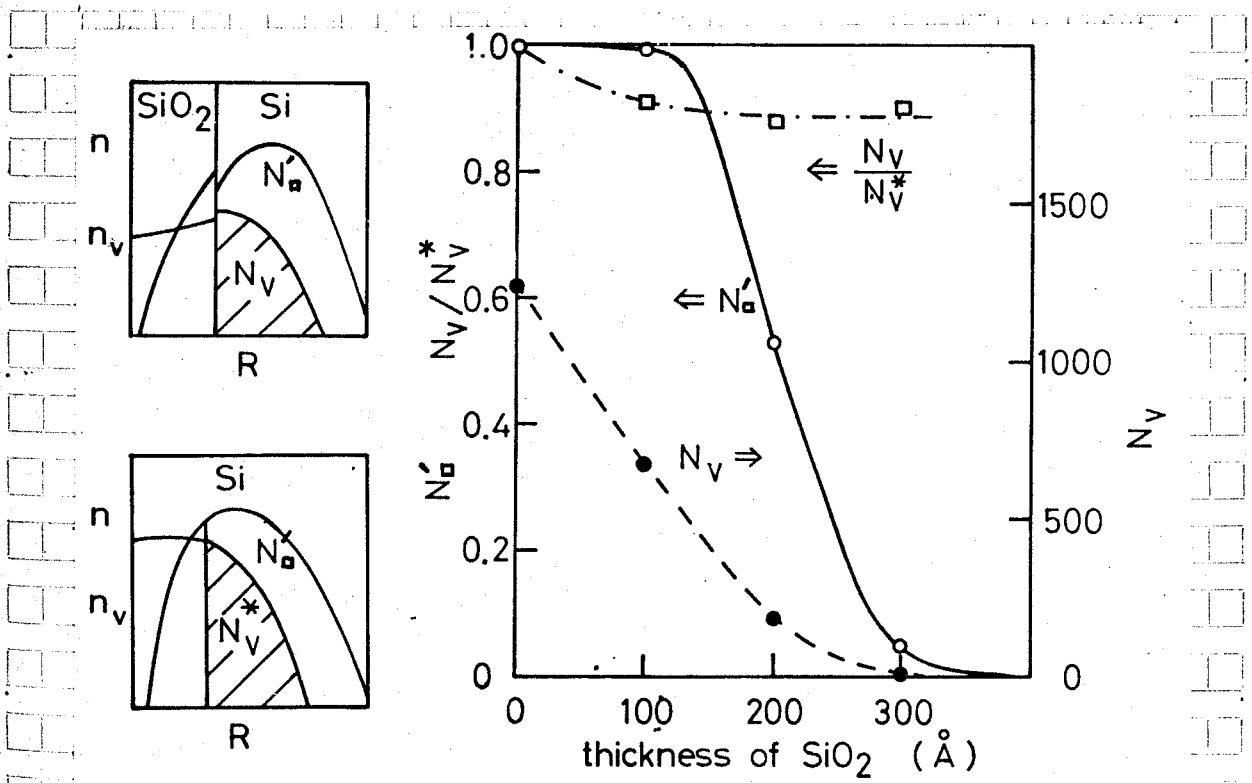


図6-11　Si中にできる格子欠陥数のSiO_2膜厚による変化
(r^{-2} pot.)

6.4 基板が非晶質となる限界注入量のイオン種依存性

前節までの解析は、主に、重いイオンを打込んだ場合に基板中にできる格子欠陥分布について行なったものであり、Si基板中に50keVでSbイオンを打込んだ場合には、8.7×10^{13}個/cm^2の打込みにより基板が非晶質となることを明らかにした。

しかしながら、この限界注入量は、打込みエネルギーが等しくても、打込みイオンの質量が異なる場合には、大きく変化することが、実験的に知られており、[10],[15],[180],[185],[186]その定性的原因としては、イオンの質量が軽い場合には、軌道電子に与えるエネルギーの割合が大きくなり、格子欠陥の生成に使われるエネルギーが減少するためと考えられる。また、この限界注入量の定量的検討は、いくつかのイオン種については、行なわれているが、[178],[187],[160]イオンの質量との関係を統一的に表わした報告はない。

本節では、比較的簡単な仮定の下に、基板が非晶質となる限界の注入量を、イオンの質量の関数として求め、イオンの質量が軽い場合に、基板が非晶質となる限界の注入量が、急激に増加するという実験結果を定量的に説明することを試みる。なお、本節においては、単一層からなる基板についてのみ考察を行なう。

6.4.1 解析の仮定および限界注入量を与える式の導出

6.1.1. で示した4つの仮定以外に、以下の仮定を置いて基板が非晶質となる限界の注入量を求める。

仮定

(5) エネルギーEのイオンが入射することにより、基板中に作られる全格子欠陥数$N_V(E)$は、Sigmundの公式[179]によって与えられる。

$$N_V(E) = \xi \nu(E) / 2T_d \qquad (6.17)$$

ここで、$\nu(E)$は核衝突により消費されるエネルギー、ξは相互作用ポテンシャルに依存する係数**であり、通常約0.8となる。

(6) $\nu(E)$は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} \nu(E) &= E_c \quad (E \geq E_c) \\ &= E \quad (E < E_c) \end{aligned} \qquad (6.18)$$

ここで、E_cは、核阻止能と電子阻止能が等しくなるエネルギーである。この仮定にしたがうと、E_cより大きなエネルギーは、すべて、軌道電子との衝突によって消費されると考えることができる。*

(7) 格子欠陥分布は、中が$2\langle \Delta R_p \rangle$で与えられる矩形分布とする。

ここで、$\langle \Delta R_p \rangle$はイオンの射影飛程分布の標準偏差である。

仮定(5)の公式は、イオン注入によりできる半導体中の格子欠陥数を求める場合に、しばしば用いられ、[10] 簡単な形で、実験結果とも比較的良く一致することが知られているので、本研究においても、この式によって、格子欠陥数を求めることにする。

---

* 仮定(5), (6)に従って、50keV Sbイオンにより、Si基板中に作られる全欠陥数を計算すると、$T_d = 25$ eVの場合には800個となり、6.2.1の結果の約半分になる。そこで、本節の計算では、次項に述べるようにT_dとして14 eVを仮定して、実験結果および、6.2.1の結果との矛盾が少なくなるようにした。

** 本節においてのみ、ξをこのように定義する。

つぎに，仮定(6)は，入射エネルギーのうちで，格子欠陥の生成に用いられるエネルギーの大きさを，近似的に与えたもので，E_cの値は，式(2.18)を用いて，簡単に計算できるので，基板およびイオンの種類を様々に変えて計算を行なう場合に，有用と考えられる。

また仮定(7)は，欠陥分布の広がりを仮定したものである。重いイオンを打込んだ場合にできる欠陥分布は，図6-5に示すように，表面から，イオンの平均飛程付近まで，ほぼ一様の欠陥ができ，平均飛程から奥では，ガウス分布的に減少する。

したがって，入射イオンが重い場合には，格子欠陥分布は，中が$\langle R_p \rangle$で与えられる矩形分布で良く近似できると考えられるが，軽いイオンによって作られる格子欠陥分布は，表面付近の欠陥密度が小さくなり，(190) 表面から平均射影飛程まで，一様な欠陥ができるという仮定は成立たない。

そこで，この両者の場合について，欠陥分布の広がりを，比較的良く近似できる量として，イオンの射影飛程分布の標準偏差を導入し，最大欠陥密度を与える位置を中心にして，$\pm\langle \Delta R_p \rangle$の範囲に欠陥が一様に分布すると考えた。

なお，欠陥分布が，最大欠陥密度を中心として，標準偏差$\langle \Delta R_p \rangle$をもつガウス分布であると仮定しても，結果は20%程度の違いであり，欠陥分布の形状は，限界注入量に，それほど大きな影響を与えないといえる。

また，イオン分布の標準偏差と，欠陥分布の標準偏差とは，必ずしも一致しないが，簡単なポテンシャルを仮定して求めた場合には，この比は0.5～1.2であり，(151) 第1近似としては，この仮定は成立つものと考えられる。

以上の仮定の下に，基板が非晶質となる限界の注入量Φ_cを求める。仮定(3)*より，N, N_v, $\langle \Delta R_p \rangle$の間には，式(6.19)の関係があるから，$\Phi_c$は式(6.17)，(6.18)を用いて，式(6.20)，(6.21)となる。

---

*179ページ参照

$$N = \Phi_c N_V / 2 \langle \Delta R_p \rangle \tag{6.19}$$

$$\Phi_c = \frac{4 \langle \Delta R_p \rangle N T_d}{\xi E_c} \qquad (E \geq E_c) \tag{6.20}$$

$$= \frac{4 \langle \Delta R_p \rangle N T_d}{\xi E} \qquad (E < E_c) \tag{6.21}$$

6.4.2 Si 基板に対する非晶質限界注入量

本項では、式 (6.20), (6.21) を, Si基板について計算し、実験値と、定量的に比較することを試みる。本項の計算においては、理論と、低温における実験値[19],[182],[189]とが最も良く一致するように、$T_d = 14eV$[176]を仮定した。なお、$T_d = 25eV$を仮定した場合には、理論的に求まる値は約2倍となる。

また、$\xi = 0.8$, $N = 5\times10^{22}(cm^{-3})$ と仮定した。代表的なイオンのSi中における$\langle \Delta R_p \rangle$[33] および E_c の値を, 表6-1に示す。

ion	mass number	$\langle \Delta R_p \rangle$ (Å)		E_c (keV)
		100 KeV	200 KeV	
H	1	1256	1364	0.0285
He	4	1497	1773	1.40
B	11	1007	1386	20.2
N	14	802	1171	37.8
Ne	20	646	1017	91.3
Al	27	504	840	185
P	31	445	762	255
As	75	204	368	1670
Sb	121	137	240	4280

表6-1 Si基板中における代表的イオンの$\langle \Delta R_p \rangle$および$E_c$

図6－12に、理論値と実験値との比較を示す。同図の実線は、室温打込みを行った場合に基板が非晶質となる限界注入量の実験値を示したもので、Siよりも重いイオンを注入した場合と、軽いイオンを注入した場合とで、曲線の傾きが異なっていることがわかる。

また、同図の破線および一点鎖線は、100keVおよび200keVで、イオンを打込んだ場合の限界注入量の理論値を示している。同図の理論値も、ほぼ同じSiの位置で、傾きが異なっており、理論値と実験値とは、定性的に良く一致しているということができる。

Siに相当する位置で理論曲線の傾きが変化する理由は以下のように考えることができる。入射イオンのエネルギーが100～200keVの場合には、表6－1から明らかなように、$E=E_c$の関係を満足するイオンは、ほぼSiの付近になる。したがって、Siよりも軽いイオンを打込んだ場合には、Φ_cは式(6.20)で与えられ、図2-7に示すように、E_cはイオンの質量の変化に対し大きく変化するので、Φ_cの傾きは、主にE_cによって決定される。一方、Siよりも重いイオンを打込んだ場合には、Φ_cは式(6.21)で与えられ、Eは一定であるから、Φ_cの変化は$\langle\Delta R_p\rangle$のみに依存し、理論曲線の傾きは小さくなる。以上の理由により、Si基板の場合には、Siよりも軽いイオンを打込んだ場合と、重いイオンを打込んだ場合とで、Φ_cの質量依存性が異なってくる。

また、同図より、Φ_cは計算されたエネルギーの範囲では余り変化しないことがわかるが、これは、軽いイオンの場合には、$\langle\Delta R_p\rangle$がエネルギーによって、大きく変化しないためであり、また重いイオンの場合には、$\langle\Delta R_p\rangle$が、ほぼEに比例して変化するためと考えられる。

つぎに、定量的な検討を行なうと、理論値と、室温で行なわれた実験値の間には、2～10倍の違いがあるが、理論値と、低温で行なわれた実験値

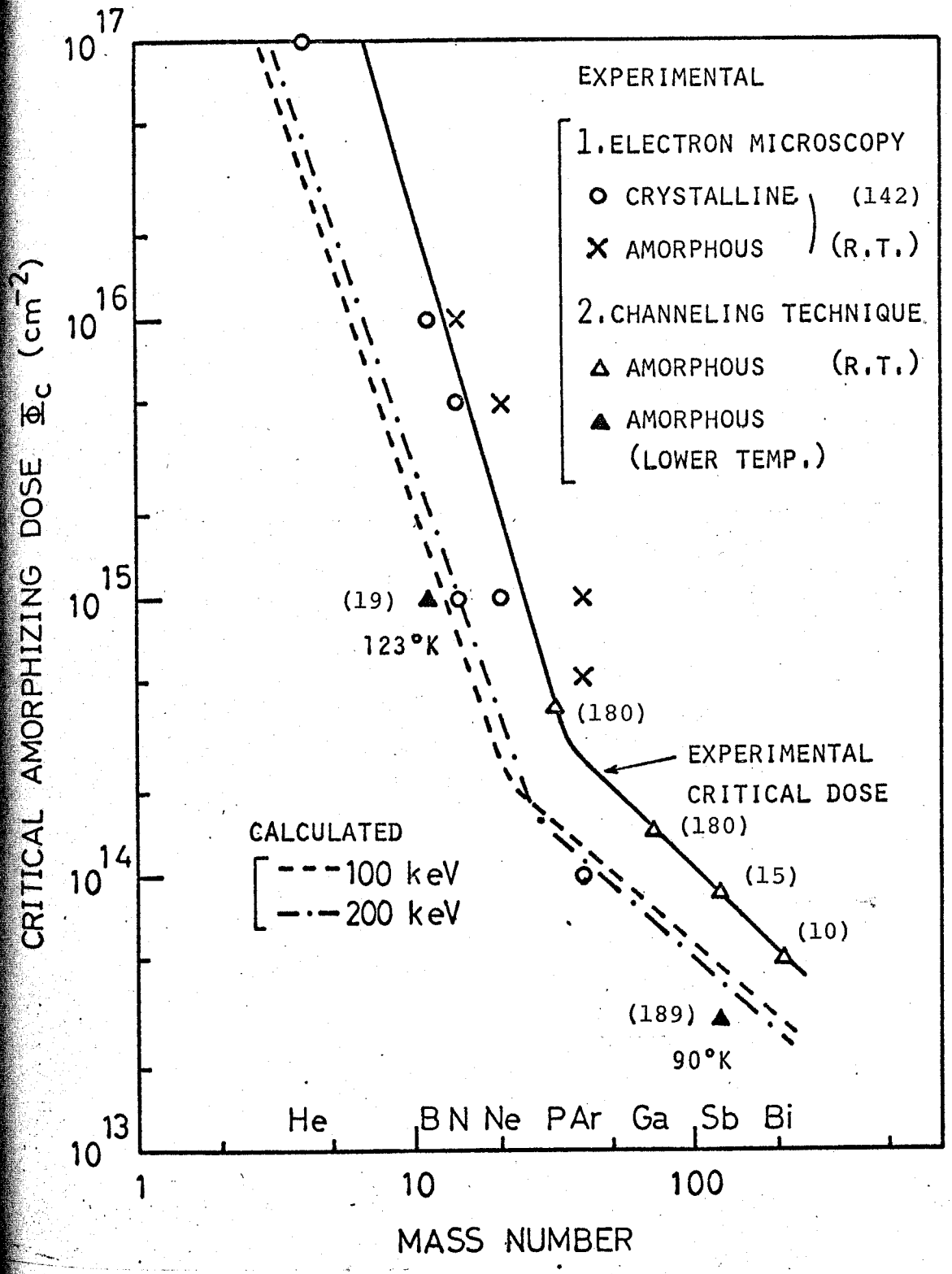


図 6-12　Si 基板が非晶質となる限界注入量のイオン種依存性
図中の番号は参考文献を示している。

(▲) と比較すると2倍以内の差で一致していることがわかる。本章の議論には、格子点を外れた基板原子が、再び格子点に戻る確率は、考慮されていないから、本章の解析で求まる理論値は、そのような確率の少ない低温における実験結果と比較することが、妥当と考えられる。

この観点から考えると、比較すべき実験データは少ないが、本節の方法によって求められたT_cは、定量的にも、実験値とほぼ一致しているということができる。また、室温打込みを行なった場合には、格子点を外れた基板原子が、再び格子点に戻る確率（室温アニール効果）を無視することができないことも明らかとなった。

6.4.3 Si以外の基板に対する非晶質限界注入量

本項では、Si以外の物質からなる基板が、非晶質となる限界の注入量について考察を行なう。

このためには、まず、基板原子が格子点を外れるために必要なエネルギーTdの値を知る必要があるが、この値については、現在、十分明らかにはなっていない。Tdを与える一つの目安としては、物質の融点が考えられ、Siの値から換算して、GeのTdを推定した報告がある。(178) この仮定が一般的に成り立つとすると、Tdの値は、通常の半導体、金属基板の場合には、最大2倍程度しか変化しないことになる。

また、図2-7より、Ecの値も、基板の種類によってはそれほど大きく変化しないことがわかるから、$\bar{x}_c$の変化は、主に、$N\langle\Delta R_p\rangle$の変化だけとなり、Auのように重い原子からなる基板でも、ダイアモンドのように軽い原子からなる基板でも、$\bar{x}_c$は1桁程度しか変化しない。

すなわち、基板の種類を変えても、非晶質となる限界注入量は、打込みイオンの種類を変えたほど急激には変化せず、ほぼSi基板と同様なイオン種依存性を示すと結論できる。

6.5 本章のまとめ

本章では、イオン注入時に発生する格子欠陥の空間分布と、基板が非晶質となる限界注入量のイオン種依存性について、理論的に検討し、実験結果との比較より以下のことを明らかにした。

(1) 基板中のイオンのエネルギー分布に基づいて、格子欠陥分布を求める方法について検討を行ない、入射イオンにより直接作られる格子欠陥数は、全体の5～10%であり、大部分は、格子点を外れた基板原子が2次的に作る欠陥であることを示した。また、2次的な欠陥生成過程を、10回程度考慮することにより、十分正確な総欠陥数が求まることを示した。

(2) (1)で検討した方法を用いて、50keVのSbイオンによりSi基板中にできる格子欠陥分布を計算し、(i) 最大欠陥密度を与える位置が、イオンの平均飛程よりも、約1/3だけ表面側にあること、(ii) 1個のSbイオンにより、Si基板中には、約1700個の格子欠陥が発生すること、(iii) Si基板は 8.7×10^{13} 個/cm^2 のSbイオンを打込むことにより、非晶質となることなどの結論を導いた。

(3) 実験結果との対応により、(2)で得られた結論が定量的にもほぼ妥当なものであることを示した。

(4) 多層構造基板中にイオン注入した場合に発生する格子欠陥分布について考察を行ない、多層構造基板の場合には、入射イオンにより直接作られる1次格子欠陥分布の形状と、全格子欠陥分布の形状とが一

一般に比例せず、計算の簡単な1次欠陥分布を用いて、全格子欠陥分布の形状を推定することができないことを明らかにした。

(5) SiO_2層を表面に付けたSi基板にイオン注入を行なった場合と、Si基板に直接イオン注入を行なって、注入後に表面層をエッチングした場合とを考え、Si中のイオン数が等しいときに、どちらの基板の方が格子欠陥数が少ないかを検討した。SiO_2層の厚みを変えた計算より、重いイオンを注入した場合には、SiO_2層を付けてイオン注入を行なった方が、格子欠陥数が約10%減少することを明らかにし、その物理的解釈を行なった。

(6) 基板が非晶質となる限界のイオン注入量を与える式を導き、Si基板に対する限界注入量のイオンの種類による変化を求めた。計算結果より、(i) Si基板中にSiよりも軽いイオンを打込んだ場合には、イオンが軽くなるにしたがって限界注入量は急激に大きくなるが、Siよりも重いイオンを打込んだ場合には、イオンが重くなっても、限界注入量は、それほど急激に小さくならないこと、(ii) 計算された限界注入量は、低温打込みの実験結果とは良く一致するが、室温打込みの実験結果よりは約1桁小さくなり、室温打込みの場合には、室温アニール効果が無視できないこと、(iii) 限界注入量の打込みエネルギー依存性は100～200keVのエネルギー範囲では顕著でないことなどの結論を明らかにした。

(7) 非晶質限界注入量が、基板の種類を変えた場合に、どのように変化するかについて検討を行ない、次1近似としては、基板の種類にはあまり依存しないことを示した。

第7章　多層構造基板中の射影飛程分布に関する実験的検討

前章までは、イオン注入法を半導体素子製作技術として用いる場合の、いくつかの問題点に関して理論的に検討し、実験結果との対応を試みてきた。しかしながら、第5章で理論的に検討した多層構造基板中のイオン分布に関しては、実験結果の報告が無く、実験との対応による理論の検証を行なうことができなかった。そこで、本章では、多層構造基板中のイオン分布を実験的に求め、理論解析との対応を行なうことを目的とする。

基板中のイオン分布を求める方法としては、活性化されたキャリア分布を求める電気的測定法と、放射化分析法などの直接不純物原子の分布を測定する方法とに大別できる。それぞれの測定法の特長を表7-1に示す。

これらの測定法のうち、多層構造基板中のイオン分布を測定するのに適した方法を考えると、まず、通常用いられる多層構造基板は、第1層が、SiO_2などの絶縁物層であるから、電気的な測定法を用いることはできない。また、たとえ、ヘテロ接合を形成して、半導体からなる2層構造基板を実現し、両半導体に共通な不純物をイオン注入したとしても、各々の半導体中で、不純物が100%活性化されるという保障はなく、打込みイオンの分布を求める方法としては不適当である。

したがって、多層構造基板中のイオン分布を求める方法としては、放射化分析法、高速荷電粒子を用いた方法などの直接測定法に限定される。

このうち、放射化分析法は、不純物原子を放射化して、表面からエッチングを行ないながら残留放射能を測定する方法であり、10～20Åの精度でエッチングを行なうことができるSi基板の場合には、最も空間分解能の高

イオン分布の測定法として広く用いられている。(11), (149), (167)

しかしながら、現在考察の対象としている多層構造基板の場合には、Si以外の物質をも用いる必要があり、例えば、SiO_2 - Si基板を考えた場合には、SiO_2のエッチング精度がSiよりも劣るため*、放射化分析法を用いて多層構造基板中のイオン分布を測定する場合には、エッチングの精度に起因した誤差が大きくなると結論できる。

このような方エッチングを必要としない直接測定法は、表7-1から明らかなように、高速荷電粒子のRutherford散乱を用いた方法だけである。したがって、以下、高速荷電粒子のRutherford散乱を用いる方法のうち、最も一般的であるHeイオンの後方散乱法を用いて、多層構造基板中のイオン分布を測定する方法について検討を行なう。

---

* SiO_2のエッチ速度は格子欠陥量により変化することが報告されており、(6) アニールを行なわずにイオン分布を測定することを目的とする本章の研究の場合には特に問題がある。

分類			非破壊測定の可否	測定対象			アニール処理	文献
				イオン種	基板	打込量(cm^{-2})		
活性化されたキャリア数の測定(電気的測定)	C-V 法	微分容量法 Coupland法 造田法	可	基板と同伝導形不純物元素	低不純物濃度半導体	10^{11}～10^{14}	要	(22) (122) (141) (154)
	抵抗率,ホール定数測定	通常法 van der Pauw法	否(表面エッチング)	基板と逆伝導形不純物元素	低不純物濃度半導体	$\gtrsim 10^{13}$	要	(8) (11) (153) (191)
	Junction-Stein法		否(角度研磨)	基板と逆伝導形不純物元素	不純物濃度の異なる数枚の半導体基板	10^{12}～10^{14}	要	(145) (197)
注入イオンの直接測定	放射能の測定	中性子による放射化(放射化分析法)	否(表面エッチング)	寿命の適当に長い同位体のできる元素		$\gtrsim 10^{15}$	不要	(11), (17), (143), (149) (167)
		放射性同位元素の打ち込み	否(表面エッチング)	放射性同位元素		$\gtrsim 10^{10}$	不要	(129) (195) (196)
	高速荷電粒子を用いた方法	Rutherford散乱	可	最も重い基板原子の1.5倍以上の質量を持つ元素		$\gtrsim 10^{15}$	不要	(133), (192) (193)
		核反応	否(表面エッチング)	核反応断面積の大きな元素(主に軽元素)		$\gtrsim 10^{16}$	不要	(7), (137) (138), (164)
		X線検出	否(表面エッチング)			$\gtrsim 10^{16}$	不要	(194)

表7-1　注入イオン分布の測定法

7.1 荷電粒子の後方散乱法を用いた不純物原子分布の測定

従来、荷電粒子の後方散乱法*は、チャンネリング効果との組合せにより、格子欠陥分布の測定法[15],[18],[19],[180],[186],[188],[189]、不純物原子の格子位置決定法[7],[133],[137],[138],[164],[192]、表面層の解析法[162],[163],[198]~[200]として有効であることは良く知られている。

しかしながら、この方法を用いて不純物原子の空間分布を測定した報告は[193],[201],[202]いずれも定性的なもので、定量的に不純物分布を測定した報告は皆無である。この理由としては、

(1) 空間分布を定量的に知るためには、イオンの基板中におけるエネルギー損失の割合を知る必要があるが、これに関する基礎データが少ないこと、

(2) 電気的に興味のある不純物濃度の場合には、後方散乱されるイオン数が非常に少なく、統計誤差が大きくなること、

(3) 測定系の雑音や、測定ビームによる試料表面の汚れのため、空間解能を十分上げることができないことなどがあげられる。

しかしながら、近年、Si, SiO_2 などに関しては、Heイオンのエネルギー損失に関する基礎データが報告されはじめたので[106],[203]本研究では、(2),(3)の問題点に関するいくつかの改善を行ない、多層構造基板中に打込まれたイオン分布を、Heイオンの後方散乱法により、定量的に求めることを試みた。

---

* 主に、Heイオンの後方散乱法

7.1.1 後方散乱法に用いるイオンの種類およびエネルギー

まず、荷電粒子の後方散乱法とは、高速の荷電粒子を測定対象基板に打込み、基板中で後方に散乱された荷電粒子のエネルギーと個数とから、基板に含まれる元素の種類、濃度、および空間分布を決定する方法である。また、次章に述べるように、チャンネリング効果と組合わせることにより、単結晶基板中の格子欠陥分布、不純物原子の格子位置決定などが行なえる。

後方散乱法に用いるイオンの種類およびエネルギーは通常以下に示す条件を満たすように選ばれる。

(1) 基板中におけるイオンのエネルギー損失の割合が、空間的に一様であり、後方散乱されたイオンのエネルギーから、基板中のどの深さで散乱されたかが一意的に決められること。

(2) 測定ビームにより、基板中に発生する格子欠陥が無視できる程度であること。

(3) 後方散乱される確率の高いこと。

(4) 空間分解能の高いこと。

まず(1)の条件を満たすためには、軌道電子との衝突によるエネルギー損失機構が支配的なエネルギー範囲を用いることが必要である。この場合には、イオンは2.1で述べたように空間的に一様なエネルギー損失を受けるが、原子核との衝突が支配的なエネルギーを用いた場合には、基板中におけるイオンのエネルギー分布は、図4-5に示すような分布となり、後方散乱されたイオンのエネルギー分布を測定しても、基板のどの位置で散乱されたものであるかを判別することができない。

図2-1よりこのような条件を満たすエネルギーはHeイオンを用い

た場合には、100keV以上であることがわかる。また図2-7より、イオンが重くなるほど、高いエネルギーが必要なことがわかる。

つぎに、(2)の条件は、章6で述べたように原子核との衝突確率が減れば満たされるから、(1)と同様、エネルギーが高いほど良く、また、同じエネルギーならば、イオンが軽いほど良いと言える。

(3)の条件は、(1)、(2)の条件と矛盾するもので、エネルギーが高くなればなるほど、Rutherford散乱における衝突断面積は減少するから、それだけ後方散乱されるイオン数が減少し、同じ電荷量の測定を行なった場合には、統計誤差が大きくなるといえる。

また、(4)の条件を満たすためには、微少距離進んだ場合にも、大きなエネルギー差になることが必要であり、電子阻止能が最も大きい領域を選ぶ必要がある。図2-1より、Heイオンの場合には、1MeV付近のエネルギーにおいて、この条件が最も良く満足されることがわかる。

このような条件の他に、実験装置の面からの条件として、安定な直流加速の行なえる装置としては、現在Van de Graaff加速器を用いた場合の5MeV程度が最高であるという条件を考え合わせると、用いるイオンの種類としては、プロトンあるいはHeが適当になり、このうち、(4)の条件から、通常はHeイオンが用いられる。* また、Heイオンの場合のエネルギーとしては、(1)～(4)の条件を最も良く満足する値として1～2MeVが用いられる。

本研究においても、1.5MeVのHeイオンを用いて測定を行なった。

---

* Heイオンより重いイオンとしてはCイオンを用いた例が報告されている。(192)

7.1.2 後方散乱法の原理

後方散乱法を用いて，基板中の不純物の種類，濃度，および空間分布を求めるための原理を図7-1に示す。 同図は，質量M_1，エネルギーEのイオンが後方散乱された場合のエネルギーの関係を示している。

イオンが基板表面にある質量M_Aの原子により，$\theta°$だけ散乱されたとすると，エネルギーおよび，運動量保存則より，散乱後のイオンのエネルギーは次式で与えられる。

$$E' = k_A^2 E \tag{7.1}$$

$$k_A = \frac{M_1 \cos\theta + \sqrt{M_A^2 - M_1^2 \sin^2\theta}}{M_1 + M_A} \tag{7.2}$$

また、質量M_Bの原子と衝突した場合には、散乱角θが一定であるから，後方散乱されたイオンのエネルギーは異なってくる。したがって、後方散乱イオンのエネルギーの測定より、基板表面にある原子の種類を識別することができる。

つぎに、基板中の深さtの位置に存在する質量M_Aの原子と衝突して，跳ね返ってきた場合を考えると、イオンは基板中を往復する間にそれだけ多くのエネルギーを失なうことになり、次式で与えられるように、基板表面で散乱されたイオンのエネルギー$k_A^2 E$よりも低いエネルギーとなる。

$$E(t) = k_A^2 \left\{ E - \int_0^{t/\cos\theta_{in}} \left(-\frac{dE}{dz}\right)_{in} dz \right\} - \int_0^{t/\cos\theta_{out}} \left(-\frac{dE}{dz}\right)_{out} dz \tag{7.3}$$

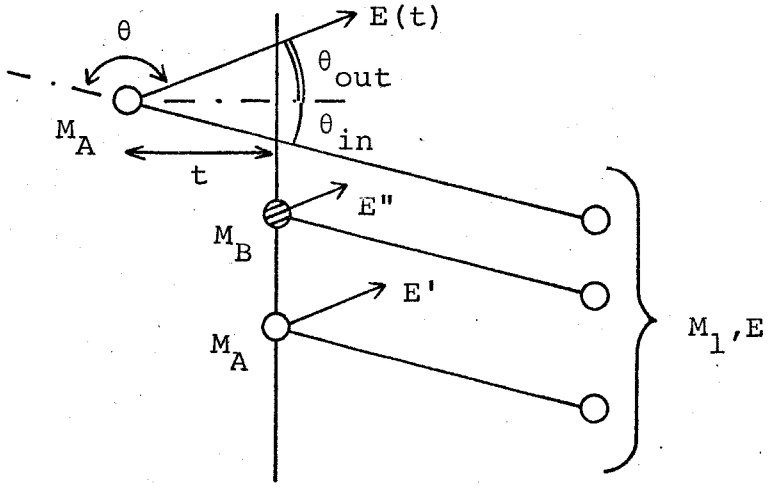


図 7-1　後方散乱法の原理

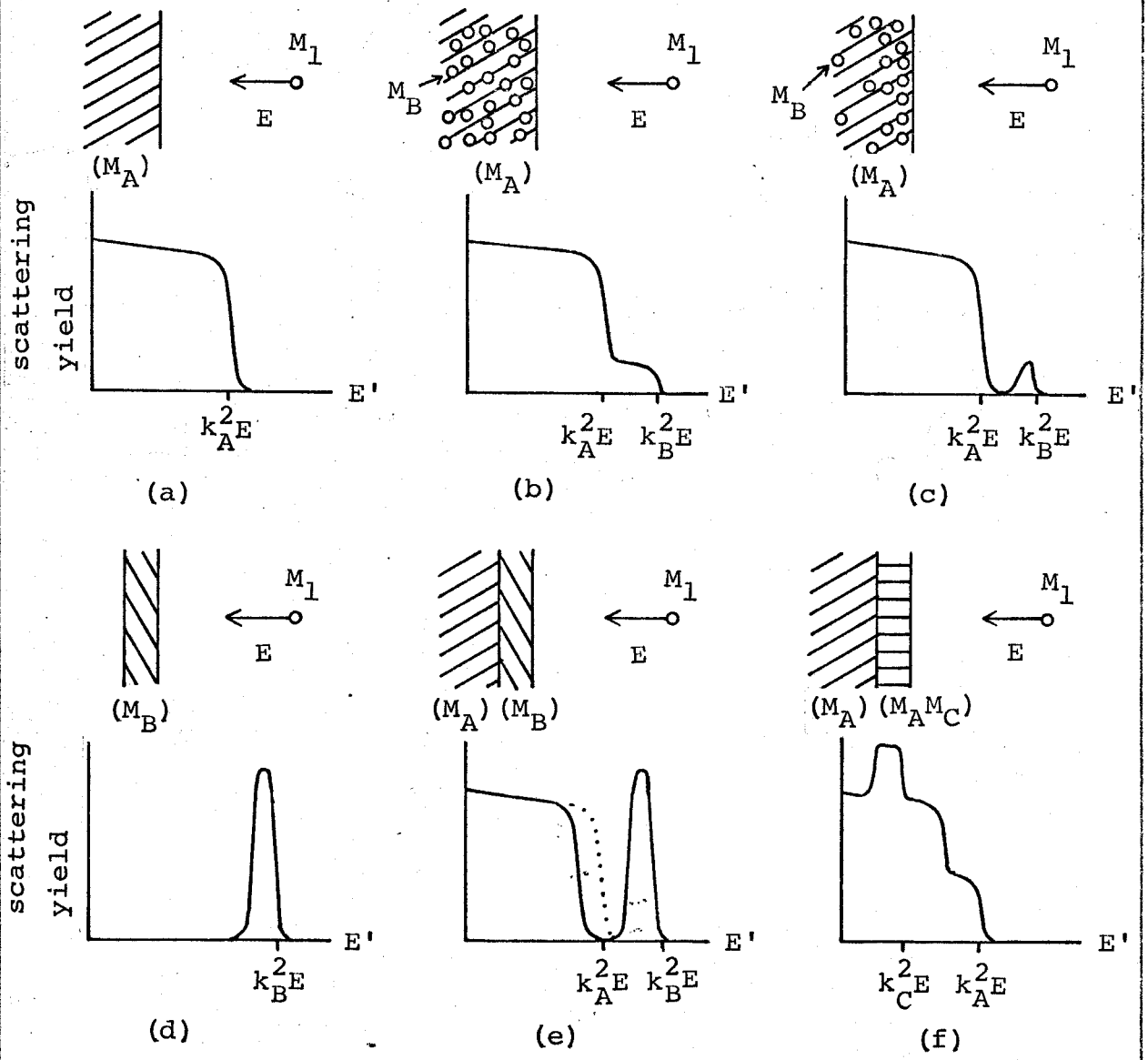


図 7-2　後方散乱法により測定できる基板の種類 および
エネルギースペクトル

ここで、$(-dE/dz)_{in,out}$ は、入射時、および散乱後基板表面に戻るまでの間に受けるエネルギー損失の割合であり、一般には、エネルギーの関数である。また、θ_{in}, θ_{out} は同図に示すようにイオンの進む方向と基板法線のなす角度で、散乱角 θ と $\theta+\theta_{in}+\theta_{out}=\pi$ の関係にある。

E, θ_{in}, θ_{out} は実験の設定条件により決まる量であるから、$(-dE/dz)_{in,out}$ が既知であれば、E' よりもを求めることができる。したがって、後方散乱されるイオンのエネルギーと個数との関係を求め、式（7.3）を用いて、エネルギーを距離に変換すると、基板中の不純物原子分布を求めることができる。

後方散乱法により解析できる基板の代表例と、得られるエネルギー・スペクトルを図 7-2 に示す。

同図(a)は、バルク基板を測定した場合のエネルギー・スペクトルである。表面で散乱されたイオンがエネルギー k_A^2E の位置に観測され、基板内部で散乱されたイオンが、ほぼ同数だけ低エネルギー側に連続して観測される。ただし、衝突断面積のエネルギー依存性のために、He イオンの場合には、散乱数は一定にはならず、同図に示すように低エネルギー側の散乱数のほうが多くなる。

つぎに同図(b)はバルク基板（構成原子の質量 M_A）中に、一様に質量 M_B の不純物が存在している場合のスペクトルである。同図に示すように $M_B>M_A$ の場合には $k_B^2E>k_A^2E$ となり、不純物濃度が $10^{19}cm^{-3}$ 以上であれば、その濃度が測定できる。ただし、$M_B<M_A$ の場合には不純物原子のスペクトルが基板原子のスペクトルに重なるため、不純物濃度が10%程度ないと測定することが困難である。

また同図(c)は、不純物濃度が深さ方向に変化している場合である。He イオンにより表面から、1000Å 程度奥までの不純物濃度を求めるためには、イオンのエネルギー損失および分解能を考慮した場合少なくとも

$M_B \geq 1.5 M_A$ の関係を満たす不純物と、基板との組合せを選ぶ必要がある。Si基板に、この関係を適用すると、不純物原子としては、少くともArよりも重い原子を選ぶ必要があることがわかる。本実験においても、Si基板中にAr原子をイオン注入して、その空間分布を測定した。

図(d)～(f)は薄膜基板を測定した場合で、薄膜単独で存在する場合には(d)のスペクトルとなり、基板上に薄膜が付いている場合には、(e),(f)のように、基板スペクトルと、薄膜スペクトルとが重なったスペクトルになる。この場合の基板スペクトルの立上りは、薄膜中を往復する間にHeイオンが失なうエネルギーだけ、低エネルギー側に移動する。また(f)に示すように薄膜を構成している元素の質量が、基板原子の質量よりも軽い場合にも、不純物原子を測定する場合と異なり、原子濃度が高いので後方散乱法により測定することが可能である。

この方法を用いると、膜厚のあらかじめ分っている薄膜の比重が測定できる。本実験においても、7.3.1で述べるように、Si上に陽極酸化法で形成したSiO_2層の比重をこの方法により測定した。

7.2 実験装置および実験方法

7.2.1 実験装置

Heイオンの加速，集束系

図7-3 に実験装置の概要を示す。Heイオンの加速は、東工大理学部の4MeV-Van de Graaff 加速器を用いて行なった。加速電圧は、入射時、および散乱後のエネルギーに対して、Heイオンのエネルギー損失の割合がSi，およびSiO_2基板中で最も大きくなり，したがって，不純物分布を測定する場合の空間分解能が最も高くなるように、1.5MeV を用いた。図2-1 より明らかなように，Heイオンのエネルギー損失の割合が最も大きくなるのは、約1MeVであるが、加速エネルギーを1MeV にすると、O原子などの軽い原子と衝突した場合に、衝突後のエネルギーに対する電子阻止能が小さくなり，往復の阻止能の組合せで決まる空間分解能は、かえって悪くなる場合がある。

加速エネルギーの選択および安定化は、プロトンのNMRにより磁界を較正した電磁石と、コロナ増幅器を用いた帰還システム*により行ない，ビームの曲げ角度は67°エネルギー安定度は10^{-3}以下である。

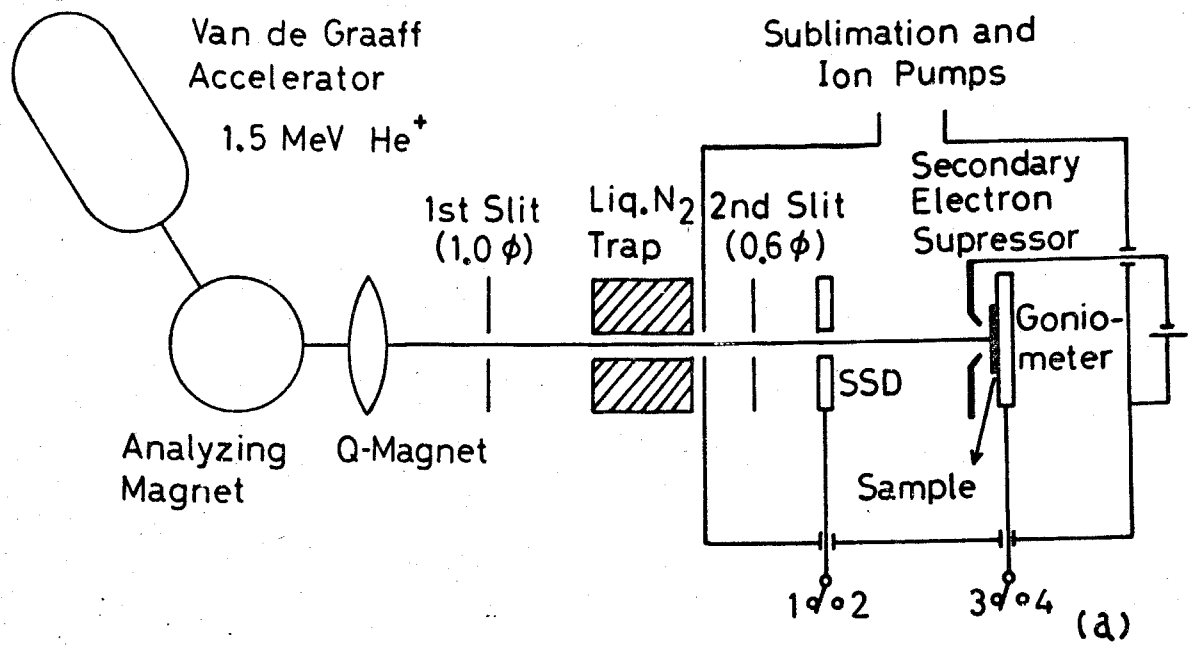
分析電磁石を通過後、イオンビームは、四極子マグネット（Qマグネット）によって、2つのスリットの中点に焦点を結ぶように収束される。

イオンビームのコリメートは、約2.5m離した、直径1mm，および、0.6mmの2つのスリットにより行なわれ、ビーム発散角は、0.05°以下と考えられる。

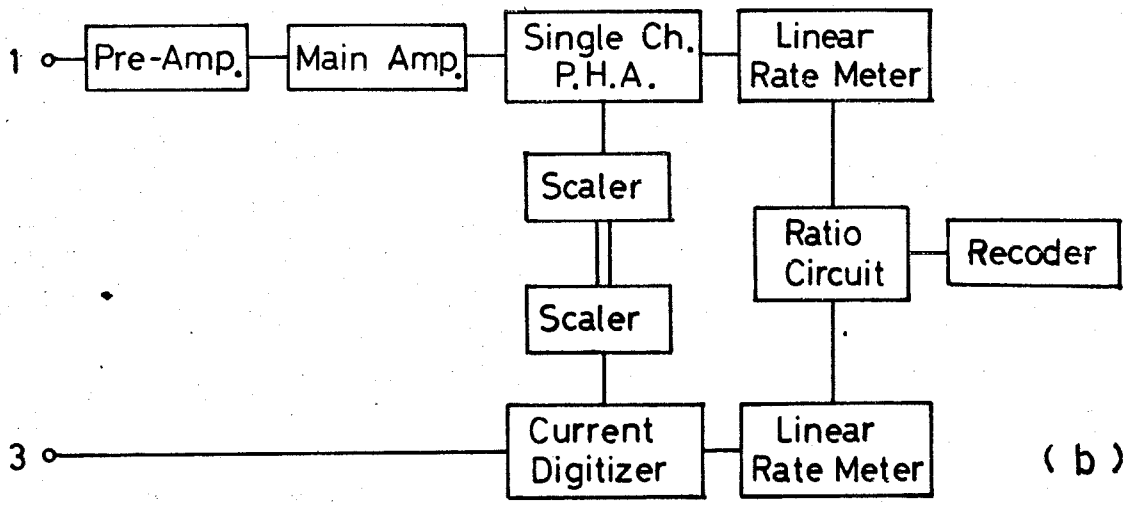
排気系は、加速器本体および、試料室直前のダクトを水銀拡散ポンプで引き、試料表面が油拡散ポンプの油で汚れるのを防いでいる。中間ダクトの

---

*磁場通過後に左右スリットに当るビーム量から、イオンのエネルギーを測定し、差動アンプにより、高電圧部のコロナ放電電流を電気的に調整して、電圧を一定に保つシステム。



Alignment of Channeling Axis



Measurement of Spectra

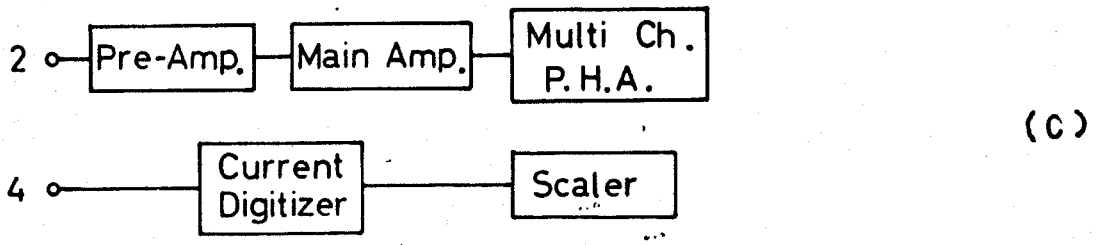


図 7 - 3　H_c 後方散乱法実験装置

真空度は 3×10^{-6} mmHg 以下である。また、ダクトの終端には、液体窒素冷却のトラップが設けられており、油拡散ポンプの油が試料室内に入るのを防いでいる。

ビーム軸合せは、ホイスリット、液体窒素トラップ、試料室のそれぞれ手前に置かれた石英*のビューアーを見ながら行ない、ビームの進行方向に一致するようにダクト、および試料室を移動させる。ダクトの移動が容易なように、ホイスリットの前と、ダクトと試料室の間はベローズが用いられている。

ビーム軸合せの際には、図7-3に示すゴニオメーターには試料を入れず、試料室内に導かれたビームが、石英で作られたホスリット、および、試料室の最後尾にある石英のマーカーの中心にくるように、試料室を調整する。

調整後に得られるビーム電流は、5～30nAである。

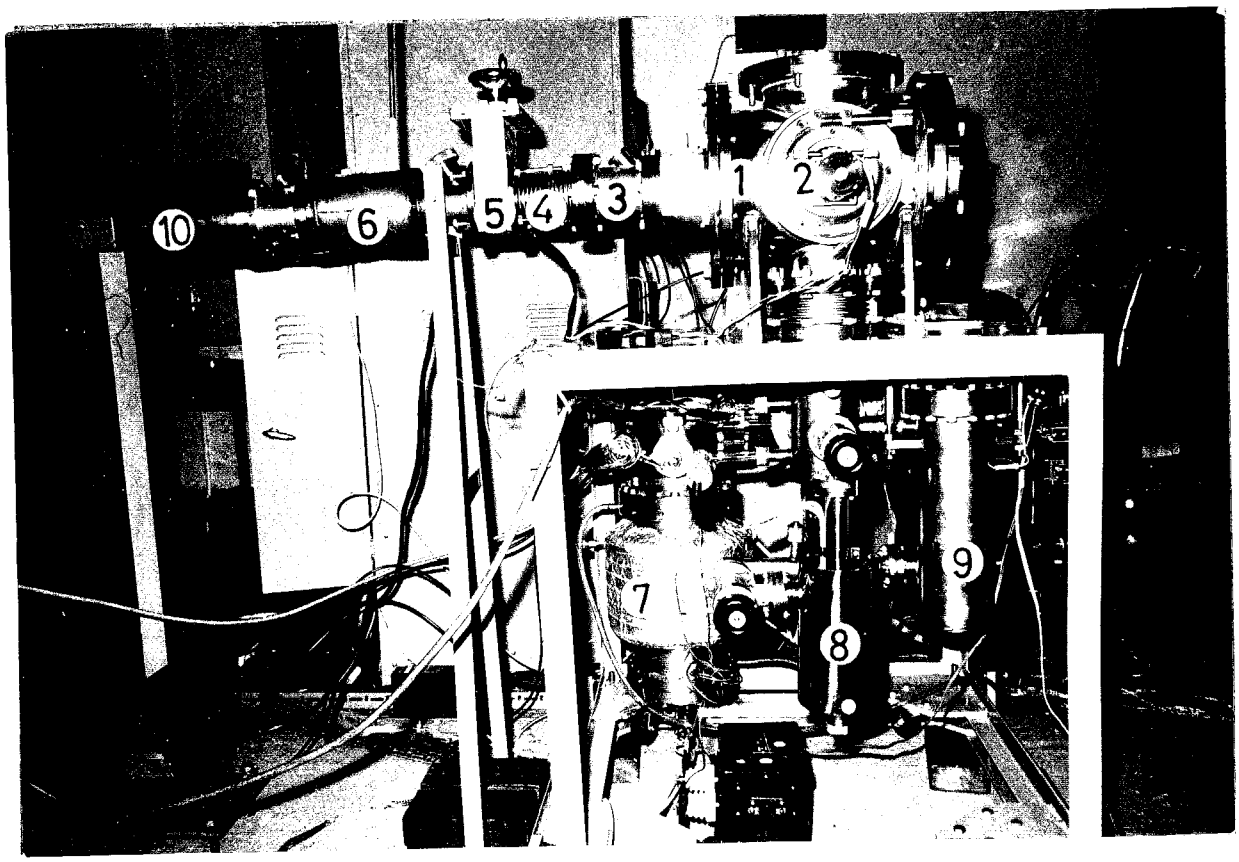
試料室

試料室内には、図7-3に示すように、試料を固定するゴニオメーター、ホスリット、および半導体検出器が置かれている。試料室の排気は、ロータリーポンプ、ソープションポンプ、サブリメーションポンプ、および、イオンポンプを用いて行ない、試料室内は、オイルフリーな 5×10^{-6} mmHg 以下の真空度に保たれている。

試料室の外形、および、排気系を示した写真を図7-4に示す。

試料は、3軸可動なゴニオメーターに、裏表2枚合せて取り付けられ、1回の真空引きにより、2枚の試料が測定できるようになっている。ゴニオメーターの回転精度は、3軸に対して、それぞれ、0.02°, 0.05°, 0.1°であり、0.02°の回転軸は、ステップモーターにより駆動する。電流測定のため、

* イオンビームが石英に当ると紫色の螢光を発するため、イオンビームの位置が確認できる。



① 試料室,　② ゴニオメーター,

③ ビュアー,　④ ベーローズ

⑤ ゲートバルブ　⑥ 液体窒素トラップ

⑦ サブリメート・イオンポンプ

⑧ ソープションポンプ

⑨ 液体窒素トラップ

⑩ ダクト

図 7－4　試料室および排気系

ゴニオメーターの試料部分は絶縁されており、また、電流値を正確に測定するために、試料部分に対して −180V をかけた2次電子抑えが付けられている。

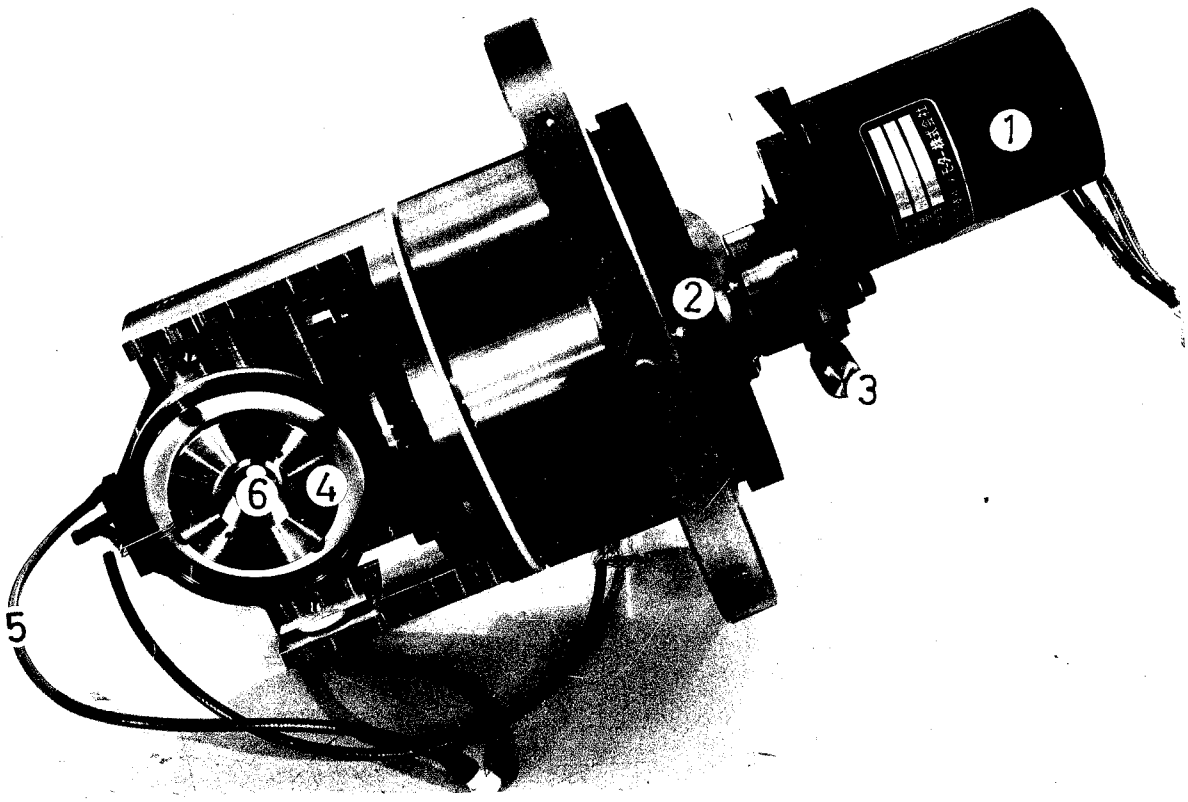
また、試料とビームとのなす角度を一定に保つたまま、ビームの当たる試料面を変えるため、ゴニオメーター全体を平行移動させる装置が付けられている。この平行移動装置を用いると、結晶軸と、ビーム方向を一致させた後に、新しい試料面を用いて測定ができ、軸合わせの間に生じる試料表面の汚れや測定ビームにより発生する格子欠陥の影響を除くことができる。

使用したゴニオメーターの写真を図ク−5 に示す。

つぎに、後方散乱イオンのエネルギーおよび個数を測定するための、半導体検出器（ＳＳＤ）について述べる。ＳＳＤは、n⁻形 Si に Au 薄膜のついたショットキー・バリア・ダイオードであり、数十Vの逆方向バイアスをかけ、空乏層の用いた状態で使用する。

He イオンが表面の Au 薄膜を貫通して空乏層中に入射すると、バレンス・バンドにいる電子を次々と励起し、ホール電子対を生成するため個々のイオンの入射に対応してパルス電流が流れる。また、イオンのエネルギーが高い場合には、励起するホール電子対の数が多くなり、パルス電流の波高値が大きくなるから、パルスの波高値および個数を電子回路により測定することにより，後方散乱イオンのエネルギーおよび個数が求まることになる。

本研究に使用したＳＳＤは，直径 1 cm の環状のもの（ORTEC社製 C-030-100-100）であり，図ク−3に示すように，イオンの入射方向に対して 180° の位置に置かれている。



① ステップモーター，（θ1軸駆動）

② θ2軸駆動ギアー，　③ θ3軸駆動ビス，

④ 2次電子抑え，　⑤ 電流観測ケーブル，

⑥ 試料取付け位置，

図 7－5　ゴニオメーター

測定回路

測定回路を図 7－3 (b), (C) に示す。同図 (b) は結晶軸合せのための回路であり、(C) は、図 7－2 に示すエネルギースペクトルを測定する回路である。結晶軸合わせの回路および方法については、次章で述べることにして、ここでは、エネルギー・スペクトルを測定するための回路、すなわち、前置増幅器, 主増幅器, および, 多重波高分析器について簡単に述べる。

a) 前置増幅器

SSDからの出力信号は、まず、前置増幅器に入れられる。前置増幅器を用いる目的は、電荷量に比例した出力電圧を得るためであり、回路としては、図 7－6 に示すように高入力インピーダンスの増幅器*に、容量で帰還をかけたミラー回路が用いられる。ここで、C_i は、SSDの空乏層容量および、前置増幅器までの同軸線容量を示している。

SSDの開放端電圧 V_i は、発生する電荷を Q とすると、$V_i = Q/C_i$ で与えられるから、SSDの逆バイアス電圧が異なったり、同軸線の長さが異なったりして、C_i が異なる場合には、同じ Q の値でも異なってくる。これに対して、ミラー回路の出力 V_o は、$V_o/V_i = -C_i/C_o$ の関係を用いると、$V_o = -Q/C_o$ となり、C_i には無関係に発生した電荷に比例した

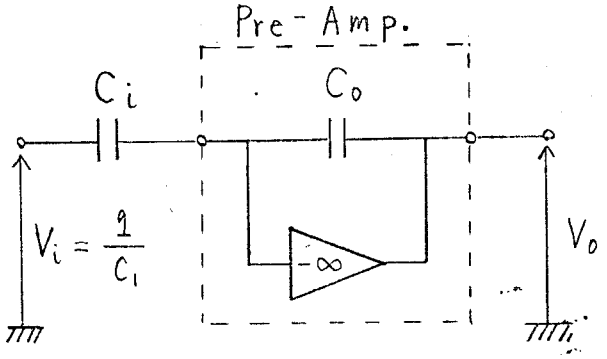


図 7－6
前置増幅器回路

---

* 通常の Pre-Amp の初段には FET が用いられている。

電圧が得られる。

SN比を改善するためには、入力容量Ciを小さくする必要があり、SSDからの同軸線を、できるだけ短かくする必要がある。本実験においても、試料室の出力コネクタに前置増幅器を直結して測定を行なった。用いた前置増幅器はORTEC社製109Aである。

b) 主増幅器

主増幅器は、数十mVの前置増幅器出力を、5V程度に増幅すると同時に、立上り数nS，立下り数十μSの前置増幅器出力を、立上り～1μS，立下り2～3μSのパルスに波形整形する。このように、バンドパスフィルターを通すことにより、周数分成分の異なる雑音を除去することができる。用いた主増幅器はORTEC社製450である。

c) 多重波高分析器

主増幅器の出力信号を、デジタル量に直すADC*とメモリーとからなっている。振幅弁別器としては、シュミット・トリガー回路を用いると、動作が速いが，これを積重ねて作ったものは、レベルの変動が一様でなく、チャンネル幅にばらつきができるので、多重波高分析器として用いられない。チャンネル幅のばらつきの少ない方式として、入力パルスをコンデンサに充電し、その電荷を直線的に放電して，その間のクロックパルス数を計測する方式が通常用いられる。

本研究に用いた多重波高分析器は、東芝製USC-3で，クロックパルス数を計測する方法を用いているが，この方法の場合にも，次に述べるチャンネルの変動という問題は避けることができなかった。

---

* Analog to Digital Converter

本実験を行なうに当って、測定回路系で特に問題となった点とその対策を以下に示す。

問題点

(1) 試料室がアンテナとなってひろう雑音。

(2) 電流値を変化させることにより、同じ電荷量をためたにもかかわらず、多重波高分析器に測定される後方散乱数が異なる現象。

(3) エネルギースペクトルを示すチャンネルの時間的変動 (1~2ch./day)

対策

(1) 前置増幅器のアースの取り方により、主増幅器出力における雑音の大きさは、10倍程度変化する。したがって、前置増幅器のケースに太いシールド線を直結して、アースに落した。また、試料室とダクトの間を電気的に絶縁することにより、前置増幅器のアースを良くとれば、外部からの雑音は総て除去できることが確かめられた。ただし、試料室と電気的に直結しているイオンポンプ電源の出す雑音は除くことができなかったので、スペクトル測定中は、イオンポンプを止め、サブリメーションポンプだけで排気を行なった。

(2) この原因は、ADCが1つのパルスの波高分析中に来た他のパルスを無視するためであることがわかった。したがって、波高分析にかけるパルスの数を減らすために、波高分析を行なう最低電圧を1V*に設定して測定した結果、1nAの電流の場合に観測される後方散乱数と、8nAの電流の場合の後方散乱数の違いは3%以内になり、観測される後方散乱数が電流値によって変化するという問題は解決した。

---

* 試料表面のSi原子により散乱されたHeイオンのエネルギーに相当するパルス高は約5Vである。

(3) 多重波高分析器のチャンネルの時間的変動が大きい場合には，異なった時刻に測定した2つのスペクトルの違いから，不純物原子の空間分布の違いを議論する場合の誤差が大きくなり，注入イオンの空間分布を定量的に測定することを目的としている本研究にとっては，重要な問題となる。

チャンネルの時間的変動の原因としては，測定回路の熱的変動が考えられるため，ADCは，測定の期間中*電源を入れたままにした。しかしながら，本実験においては，1～2 ch./day のチャンネル変動が避けられなかったので，実験期間中，毎日，Au薄膜の付いたSi基板を測定し，AuとSiとのスペクトルを基準にして，試料スペクトルのチャンネル変動を補正した。したがって，実験結果に含まれるチャンネル変動の誤差は，1ch. 以下と考えることができる。

*1回の実験期間は約1週間である。

7.2.2 実験方法

前項で述べた実験装置，および測定回路を用いることにより，図7-2に示す後方散乱スペクトルを測定することができる。

不純物分布の定量的測定を行なう場合に，特に問題となった点と，その対策を以下に示す。

Pile-up現象

SSDを用いた測定で，一般に問題となるのは，2つ以上のパルスが同時に発生した場合に，その和のエネルギーを持ったイオンが，1つ来たと見なしてしまうPile up現象である。このような現象の起る確率が多い場合には、基板原子により散乱されたイオンのスペクトルが$k_A^2 E$の位置よりも高エネルギー側に尾を引くスペクトルとなるから、図7-2(b),(c)に示すように基板中に微量に含まれる不純物原子の濃度，空間分布を求める場合に問題となる。

本章の測定も，(c)の場合に相当し、その影響を無視することはできなかった。したがって、pile upの影響を少なくするため、電流値を小さくして測定を行ない，また、後に示すように、得られたエネルギースペクトルから、pile up分に相当する量を差引いて不純物の空間分布を求めた。

試料表面の汚れ

測定中に試料表面が汚れて，表面層が形成されると，表面層を通過する際のエネルギー損失のために，同じ深さで後方散乱されたイオンでも、観測されるエネルギーが低くなり，同じ不純物分布を測定した場合にも、観測されるエネルギースペクトルは異ってくる。したがって，試料表面の汚れは、不純物原子の空間分布を定量的に測定する場合には、特に問題となる。

試料表面が汚れる原因としては、ビームにより運ばれた拡散ポンプの油が分解して、C化合物が試料表面に付着することによるものが最も多く、この場合には、膜厚が数十Å以上になると、後方散乱粒子のエネルギーのずれが無視できなくなる。

本実験では、このような試料表面の汚れの影響を避けるため、(1) 試料室の排気をイオンポンプで行ない、(2) ダクトと試料室の間に液体窒素トラップを設けて、試料室内がオイルフリーになるようにした。また、(3) 測定中に、ゴニオメーターを回転させて、ビームの当る試料面が常に変化するようにして、試料表面の汚れを防いだ。

この結果、長時間の測定を行なった場合にも、後方散乱スペクトルにC原子のスペクトルは表われないことが確かめられ*、このことから、試料表面の汚れによるイオン分布の見かけ上の変化は無視できる程度であると結論した。

---

* 液体窒素トラップを付けずまた、試料を回転させずに行なった実験では、試料表面に黒点が付き、後方散乱スペクトルに、顕著なC原子のスペクトルが表われた。

7.3 測定試料の製作

測定に用いた基板は、(111) 面のFZ-N形Si単結晶で、比抵抗は10Ω cm以上である。この基板上に、陽極酸化法により、300Å ～ 1000ÅのSiO_2層を形成し、SiO_2-Si基板に50keVでArイオンを注入して測定試料とした。

7.3.1 陽極酸化

陽極酸化は、白金電極を陰極として、修酸飽和溶液を用いて行なった。酸化時の電流密度は5mA/cm^{2}一定であり、酸化膜厚のむらをなくすため、光を照射しながら行なった。エリプソメトリーを用いて膜厚を測定した結果、この実験条件において、200Åから1.500ÅまでのSiO_2膜が、約100Å/minの割合で、均一に製作できることが確かめられた。

製作された膜の組成と比重は、Heイオンの後方散乱法によって測定した。この場合の後方散乱スペクトルは、図7-2(f)に示すスペクトルとなり、同図と結晶軸方向から測定したチャンネルスペクトル*とを用いると、SiO_2中のSiおよびO原子により散乱されたイオンのスペクトルが求まる。(162)

結果の一例を図7-7に示す。同図の横軸は後方散乱イオンのエネルギーを表わしており、1.Ch.は2.17keVに対応する。** 同図で、Siからの散乱数と、Oからの散乱数との比をとり、それぞれの衝突断面積の比(162) ($6_{Si}/6_O = 3.34$) で補正すると、酸化膜中におけるSi原子とO原子との比が求まる。

同図に示すように、酸化膜の組成は、厳密には$SiO_{2.07}$であるが、

---

* チャンネル・スペクトルの測定法に関しては次章参照
** 導出法は次節参照

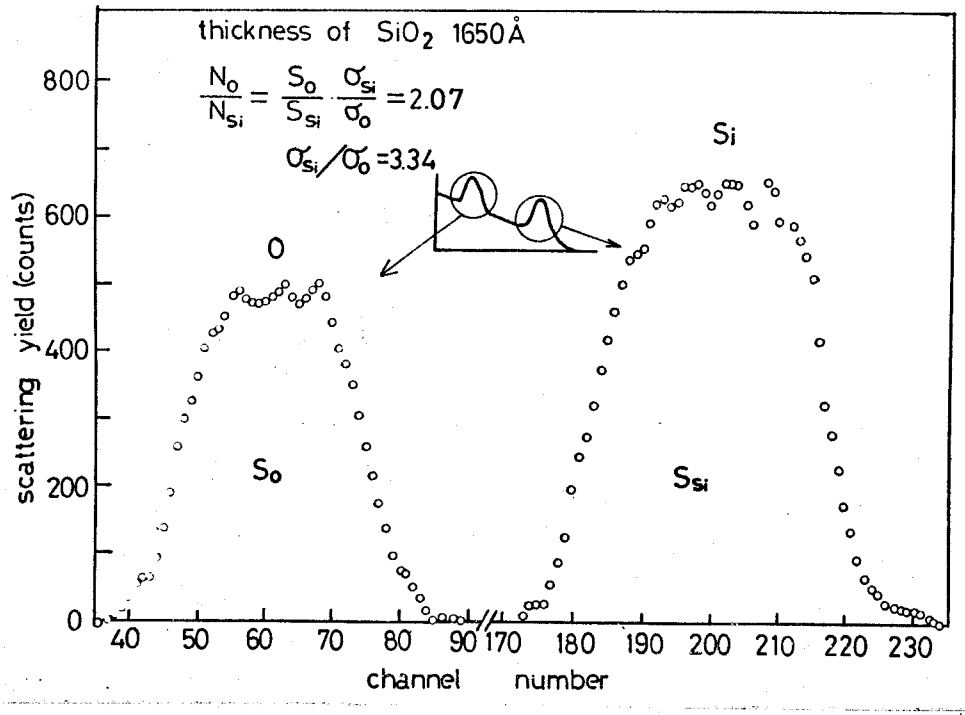


図7-7 SiO_2 層からの後方散乱スペクトル

かなり良い近似で SiO_2 とみなせるので、次節に述べる注入イオン分布の理論的検討は SiO_2 として行なった。

つぎに SiO_2 層の比重は、図7-7に示す、O原子あるいはSi原子のスペクトルの半値幅と、次節に示す SiO_2 中のHeイオンのエネルギー損失を用いて、求めることができる。(162) 測定結果を図7-8に示す。同図の横軸は、エリプソメトリーより測定された SiO_2 層の膜厚であり、縦軸は、SiO_2 中のO原子スペクトルの半値幅である。

同図より、SiO_2 層の厚みが500Å以下の場合には、測定系の分解能によって定まる半値幅のために、正しい比重を求めることができないが、比重は、SiO_2 層の厚さに無関係に、ほぼ1.8とみなせると結論できる。

なお、図7-7に示すSi原子によるスペクトルを用いて求めた値も実験誤差範囲内で上記の値に一致した。

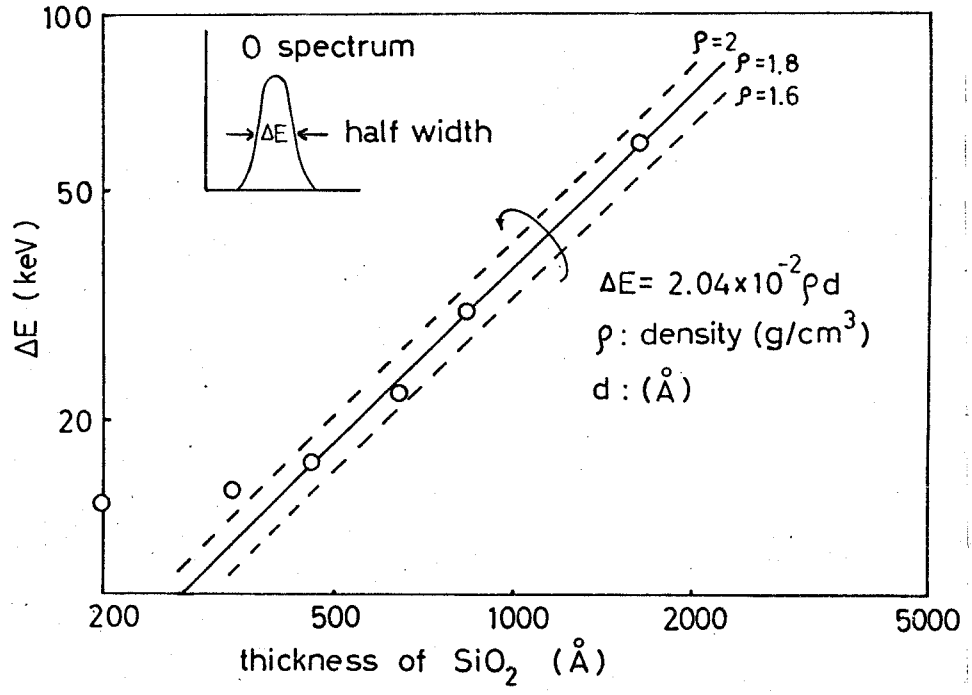


図7-8 陽極酸化 SiO_2 の比重の測定。SiO_2 中のHeイオンのエネルギー損失の割合は，文献(106)を用いた。

7.3.2 イオン注入

図7-2(C)に示すように、Siあるいは、SiO_2基板中の不純物原子分布を測定する場合には、打込みイオンは少なくともArよりも重い原子でなくてはならない。また、Heイオンと不純物原子との衝突断面積は、不純物原子番号の自乗に、ほぼ比例して大きくなるから、重いイオンを注入した場合には、同じ測定電荷量に対して、後方散乱数が増加し、統計誤差を少なくすることができる。

一方、打込みイオンが重くなると、図1-2に示すように、同じ加速エネルギーで打込んだ場合には、イオン分布の平均値および分散が小さくなり、測定系の分解能が十分でないことの影響を強く受けることになる。

本研究に用いたイオン注入装置の最高加速電圧は50kVであるので、上に述べた2つの条件を最も良く満足するように、Arイオンを、50keVのエネルギーで打込んだ。この場合、章3の解析から求まるSi基板中の射影飛程分布の平均値、および、標準偏差は、それぞれ、504Å, 201Åとなる。一方、比重を1.8と仮定して求めたSiO_2基板中の射影飛程分布は、平均値および標準偏差が、それぞれ、591Å, 217Åとなる。このように、陽極酸化法でSiO_2層を製作した場合には、膜の比重が小さいために、射影飛程分布の平均値および標準偏差が、溶融石英に比べて、50%近く大きく、図5-5に示す方法で理論的に予測されるSiO_2-Si境界面におけるイオン濃度は、Si基板中のほうが約8%高い。

つぎに、打込みに用いた基板のSiO_2層の厚みは、SiO_2中の50keV Arの平均射影飛程より、SiO_2層の厚みが、335Å, 460Å, および650Åのものを用いた。

打込みは、上記の3種類の多層構造基板と、Si単一層からなる基板と

を並べて、ビームを約10cm×10cmに振らして同時に行なった。ビームの均一性を確かめる予備測定より、ビームの場所的な不均一は5%以内と結論できる。打込み量の測定は、ファラデーカップを用いて行ない、打込み速度0.16μA/cm²で、1×10¹⁶個/cm²を打込んだ。

7.4 測定結果

本節では、第1項で後方散乱スペクトルからイオンの空間分布を求める方法、および、測定系の分解能の影響に関する考察を行ない、第2項では、SiO_2-Si基板中のArイオン分布を測定した場合のエネルギースペクトルに関して、理論と実験との比較を行なう。また第3項では、エネルギースペクトルからイオンの空間分布を求めた結果について述べる。

7.4.1 エネルギー分解能の決定

本項では、Si単一層基板中の50keV Arイオンの分布をHeイオンの後方散乱法により測定し、LSS理論から予想されるイオン分布との比較から、測定系の精度、および分解能について考察を行なう。

Si中に50keVで打込まれたArイオンの後方散乱スペクトルを図7-9に示す。同図の横軸は、多重波高分析器のチャンネル数で示されているが、後方散乱エネルギーが既知のいくつかの試料を測定して、較正することにより、後方散乱されたHeイオンのエネルギーに変換することができる。

エネルギー較正試料としては、Si基板のほかに、Au薄膜を蒸着したSi基板、およびSiO_2薄膜を形成したSi基板を用い、基板表面のSi, Au, および0原子で散乱されたイオンのエネルギーから、チャンネル数の較正を行なった。

AuおよびSiO_2層の付いたSi基板の後方散乱スペクトルは、図7-2(e)および(f)のようになるが、膜厚が薄いため*、Auおよび0に対応したスペクトルは、鋭いピークを示す。したがって、ピーク位置のチャンネルが、式(7.1)で与えられるエネルギーに対応していると考えた。一方、

* 製作条件より膜厚は両者とも50Å程度と考えられる。

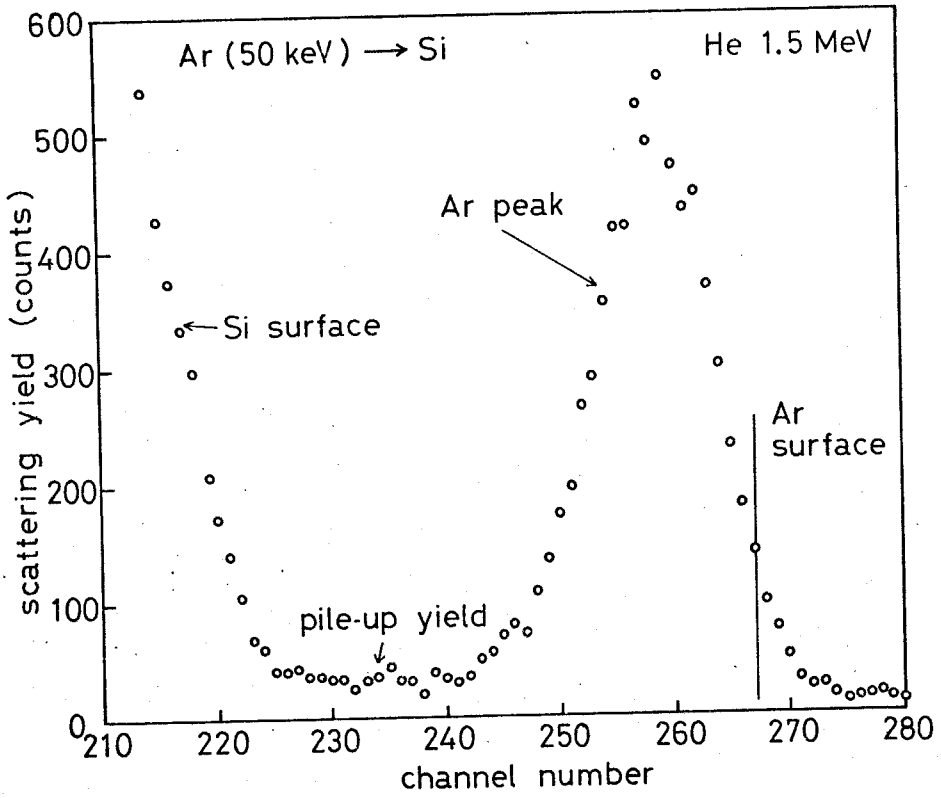


図 7-9　Si 基板中の 50 keV Ar イオン分布を測定した後方散乱スペクトル。

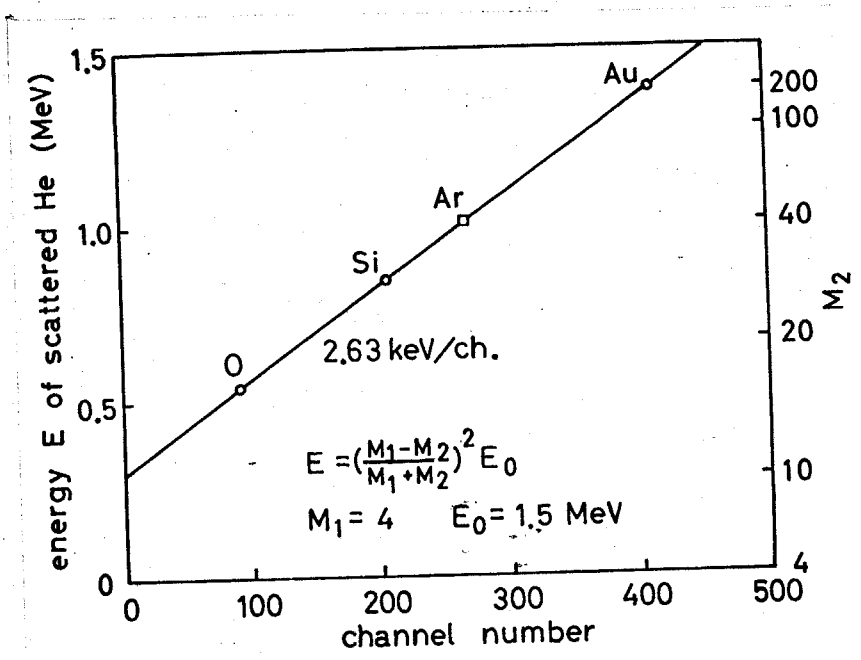


図 7-10　多重波高分析器チャンネル数の較正。M_1 は He イオンの質量数，M_2 は測定対象物の元素の質量数である。図中の式は，180° 後方散乱の場合である。

Si基板の場合には、後方散乱スペクトルは、図7-2(a)のようになる。したがって、表面付近で、後方散乱数が、1/2に減少するチャンネルが、Si基板表面で散乱されたHeイオンのエネルギーに対応すると考えた。

式(7.1)に$\theta = 180°$, $E = 1.5\,MeV$を代入して、それぞれの原子でHeイオンが散乱された場合のエネルギーと、チャンネル数との関係を示したのが図7-10である。同図より、チャンネル数と後方散乱イオンのエネルギーとの関係は直線で示され、測定系の線形性は良いことがわかる。また、直線の傾きから、1ch.は2.63keVに対応すること、および、基板表面にあるAr原子によって散乱されたHeイオンのエネルギーは267ch.に表われることがわかる。図7-9には、その位置をAr surfaceとして示してある。

図7-9より、Arイオンの Si中における空間分布を求めるためには、式(7.3)の$(-dE/dz)$にSi中におけるHeイオンのエネルギー損失の割合を代入して、エネルギーを距離に変換する必要がある。

Si中におけるHeイオンのエネルギー損失の割合に関しては、いくつかの実験報告があり、[106][203] その値は、2割程度のばらつきがあって、十分正確に求まっているとはいえない。この値が真の値よりも大きい場合には、それに反比例して、Arイオンの分布は、平均値, 標準偏差ともに、見かけ上実際よりも小さくなるし、また、小さ過ぎる場合には、平均値, 標準偏差とも、実際よりも大きくなる。

とくに、SiO_2-Si基板中のイオン分布を測定する場合には、SiO_2中のエネルギー損失の割合と、Si中のエネルギー損失の割合とによって、SiO_2中のイオン分布の形状と、Si中のイオン分布の形状とが独立に変化するので、境界面におけるイオン濃度分布の段などを議論するためには、SiO_2中と、Si中とにおける、エネルギー損失の割合の値が重要となる。しかしながら現在、十分正確な値は明らかではないので、少くとも、その定性的結論が変ら

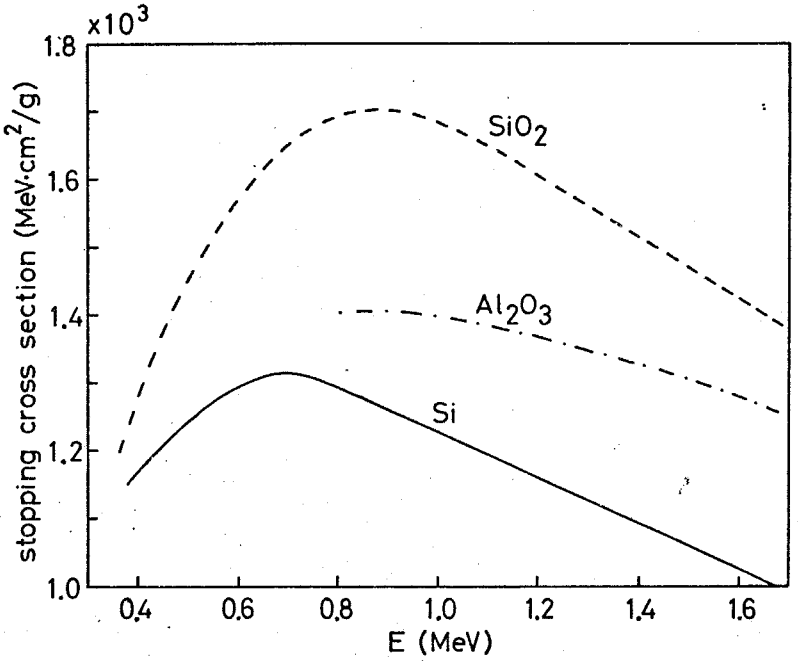


図7-11
Si, SiO_2 および Al_2O_3 中のHeイオンのエネルギー損失の割合。(106), (162)

ないように、以下の議論には同一報告(106)にあるSi中とSiO_2中におけるエネルギー損失の割合を用いることにする。

Si, およびSiO_2中のHeイオンのエネルギー損失の割合を図7-11に示す。同図には、7.5の議論に用いるAl_2O_3中のHeイオンのエネルギー損失の割合も同時に示してある。(162)

同図より、1.5MeVでSi中に入射したHeイオンは、基板中を進んで、エネルギーを失なうにしたがい、より大きなエネルギー損失を受けることがわかる。しかしながら、同図より1.5MeVのHeイオンがSi中で表面から1000Å進む間に失なうエネルギーを近似的に計算すると、約25keVであり、このような範囲内ではイオンのエネルギー損失の割合は、ほぼ一定とみなすことができる。

また、散乱後についても全く同様なことが言えるから、表面から1000Å程度までの深さについて不純物原子分布を議論する場合には式(7.3)で、

$(-dE/dx) = \varepsilon = const.$ とおいて，$E(t)$ と t との関係を解析的に求めることができる。$\theta_{in} = \theta_{out} = 0$ と置いた場合の結果を次式に示す。

$$E(t) = k_A^2 E - (k_A^2 \varepsilon_{in} + \varepsilon_{out})\, t \qquad (7.4)$$

$$t = \frac{\Delta E}{k_A^2 \varepsilon_{in} + \varepsilon_{out}} \qquad (7.5)$$

ここで、$\Delta E = k_A^2 E - E(t)$ は表面で散乱された場合のHeイオンのエネルギーと、深さ t の位置で散乱された場合のエネルギーとの差である。また、ε_{out} は、Ar原子によって散乱された後のHeイオンのエネルギー損失の割合である。散乱直後のイオンのエネルギーは、正確には、式(7.3)の右辺第1項 $\{k_A^2 \{E - \int (-dE/dx) dt\}\}$ で与えられ、t の関数となるが、中カッコ内の第2項は第1項に比べて十分小さいので，ここでは、$k_A^2 E$ に対するエネルギー損失の割合を ε_{out} と考え，深さ t には無関係な値と仮定した。イオンのエネルギー損失の割合は、図7-11から明らかなように、イオンのエネルギーによっては、それほど急激には変化しないから、この仮定は、表面付近の分布を議論する場合には、十分妥当な仮定と考えられる。

Heイオンが Ar原子と衝突して $180°$ の後方散乱を受けた場合，$k_A^2 = 0.669$ となる。したがって，ε_{in} および ε_{out} は $E = 1.5\,MeV$ および $E = 1.0\,MeV$ に対応する値として図7-11より求めることができる。この値および，$\Delta E = 2.63\,keV$ を式(7.5)に代入することにより、Si中のAr原子によって散乱されたHeイオンについては、多重波高分析器の1ch.が Si基板中の $58\,Å$ に相当することがわかる。

つぎに，この結果に基づいて，図7-9より求めたSi基板中のArイオン分布を図7-12に白丸で示す。同図の分布は，図7-9に示すArピークから，pile up yield と考えられる量を直線で近似して差し引いた残りの後方散乱数で規格化してある。また，同図の実線はLSS理論から求まる

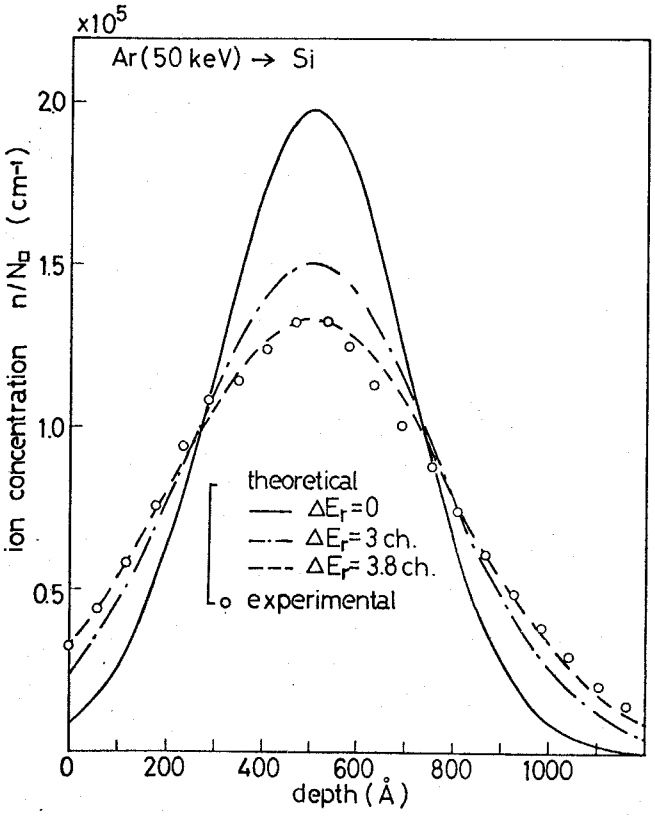


図 7-12
Si 基板中の 50 keV Ar イオンの分布。理論値，実験値とも，1個の入射イオンが確率的に占る空間分布を示している。

理論値を示しており，平均射影飛程に関しては，理論値と実験値とは良く一致しているが，実験的に求まる標準偏差は，理論値よりも約1.5倍広がっていることがわかる。

このように分布が広がる原因の1つとして，測定系のエネルギー分解能が十分高くないことが考えられるため，以下，測定系のエネルギー分解能がイオンの空間分布に及ぼす影響について検討を行なう。

測定系のエネルギー分解能を決定している要因としては，半導体検出器の出す雑音パルス，増幅器の雑音，測定ビームエネルギーの変動，基板中のHeイオンのエネルギー損失の割合のゆらぎなどが考えられるが，このうち第1の要因が支配的であると考えて，測定系の分解能を独立に測定することを試みた。

すなわち，第3番目までの要因によって生ずる見かけ上の散乱エネルギー

の変動を求める方法として、Si基板上にAu薄膜の付いた試料の後方散乱スペクトルを測定し、Au薄膜に対応したスペクトルの分散を求めた。この場合Au薄膜の厚みが十分薄ければ、Au層中におけるイオンのエネルギー損失は無視できるから、Auによって後方散乱されたHeイオンのエネルギーは、すべて式(7.1)で与えられ、測定系の分解能が十分高ければAuからの後方散乱スペクトルはδ関数的になる。

一方、測定系の分解能が十分高くないときは、その分解能に対応してAuのスペクトルは広がりを持つことになるから、Au薄膜のスペクトルの分散が測定系の分解能を実験的に与えているということができる。この測定より測定系によるエネルギーのゆらぎをガウス分布で近似した場合の、標準偏差として、3ch.(7.9keV)が得られた。

測定系の分解能として、3ch.という標準偏差を用いた場合に、図7-12の理論値がどのように観測されるかを予想したのが、同図の一点鎖線である。この曲線は、ガウス分布で与えられる理論曲線を、ガウス分布を仮定した測定系の分解能でぼかした分布であり、このような2つのガウス分布のコンボリューションを行なうと、結果はやはりガウス分布となり、その分散は、各々分散の和になる。

しかしながら、同図に示すように、実験結果は、このように独立に測定したエネルギー分解能を考慮した分布よりも更に広がっていることがわかる。この原因としては、

(1) 実験的に得られるSi中のArイオン分布が、理論値よりも広がっていること。

(2) Si中におけるHeイオンのエネルギー損失の割合が正確に与えられていないこと。

(3) 基板中の不純物原子分布を求める場合の測定系の分解能は、上に述べた方法によっては十分正確に求めることはできないことの3つが

考えられる。

まず、ずれの原因については、Arイオン分布の理論値は、章3の結果に基づいて、2階微分方程式を用いて求めたものであり、(33) 同一プログラムを用いて計算した他のイオンについては実験値と良く一致している。(122)(197)
したがって、ここでは、Arイオンについても理論値は正しいものと考え、ずれの原因によって、理論と実験とがずれていることはないと考える。

つぎに、ずれ2の原因として、Heイオンの Si 中におけるエネルギー損失の割合が異なっていることが考えられるが、この場合には、分散ばかりでなく、分布の平均値もずれて測定されることになる。しかしながら、図7-12は、平均値に関しては良く一致しているから、このような分散だけのずれはエネルギー損失の割合が異なっていることでは説明することができない。

したがって、このような分布の違いの原因としては、測定系のエネルギーの分解能が、上に述べた方法で測定した値よりも、大きくなっていることが考えられる。基板中の不純物原子分布を測定する場合のエネルギー分解能が、基板表面の原子を測定して求めた分解能よりも悪くなる原因の1つとしては、上に述べたずれの要因である基板中におけるイオンのエネルギー損失の割合にゆらぎがあることが考えられる。

基板中におけるイオンのエネルギー損失の割合のゆらぎに関する定量的検討は、現在十分明らかではないが、ここでは、このような原因をも含めた測定系全体のエネルギー分解能のために、図7-12の実線で示された分布が、同図の実験値のように観測されると考えて、測定系のエネルギー分解能を求めた。

同図より、理論値と実験値とが一致するように測定系の分解能を求めると、分解能は、ガウス分布で近似した場合の標準偏差が3.8ch.(10keV)となることが示された。したがって、次節以後の議論は、測定系の分解能として、標準偏差10keVを仮定して行なう。

7.4.2 測定系の分解能を考慮した理論スペクトルと実験値との比較

本項では，測定系の分解能を考慮した場合に，多層構造基板中の不純物原子で散乱されたHeイオンのエネルギー・スペクトルが，どのように観測されるかについて理論的検討を行ない，実験値と比較する。

単一層基板中の注入イオンの射影飛程分布は，近似的にガウス分布となるので，測定系の分解能を，やはりガウス分布と仮定した場合の後方散乱スペクトルは，前項で示したように，両者の分散の和を分散とするガウス分布となる。しかしながら，多層構造基板中のイオン分布は，全体を1つのガウス分布と見なすことはできないので，以下に示す方法で，測定系の分解能の影響を考慮する必要がある。

まず，考察の対象とする基板として，SiO_2 - Si のように，5.2.2 に示す近似解析法が成立つ2層構造基板を考える。この場合，各層中のイオン分布は，それぞれガウス分布の一部で表わされ，第1層の厚みを d，第1層中，および，第2層中におけるイオンの射影飛程分布の平均値，および分散の理論値を，それぞれ，$\langle R_{p1}\rangle$, $\langle \Delta R_{p1}\rangle$, $\langle R_{p2}\rangle$, $\langle \Delta R_{p2}\rangle$ とすると，$\langle R_{p2}\rangle$ は式（5.4）を満たす。つぎに，第1層中および，第2層中のエネルギー損失の割合から求まる1keV当りの距離をそれぞれ t_1（Å/keV），t_2（Å/keV）とすると，第1層，および，第2層中の距離とエネルギーの関係として次式が求まる。

境界　$E_I = d / t_1$　(7.6)

第1層　$\langle E_1\rangle = \langle R_{p1}\rangle / t_1$　(7.7)

$\langle \Delta E_1\rangle = \langle \Delta R_{p1}\rangle / t_1$　(7.8)

第2層　$\langle E_2 \rangle = \dfrac{d}{t_1} - \dfrac{d - \langle R_{p2} \rangle}{t_2}$　(7.9)

$\langle \Delta E_2 \rangle = \langle \Delta R_{p2} \rangle / t_2$　(7.10)

ここで、$\langle E_1 \rangle$, $\langle \Delta E_1 \rangle$, $\langle E_2 \rangle$, $\langle \Delta E_2 \rangle$ は，それぞれエネルギー・スペクトル上における第1層中，および第2層中のイオン分布の平均値および標準偏差である。

したがって，測定系の分解能が十分に高ければ，後方散乱イオンのエネルギー・スペクトルは，第1層に対応したエネルギー領域と，第2層に対応したエネルギー領域に表われる2つのガウス分布の一部を合成したものになる。ただし，第1層中と，第2層中とにおけるHeイオンのエネルギー損失の割合は，それぞれ異なるため，一般には $t_1 = t_2$ とはならず，エネルギー・スペクトル上の分布を，そのまま実空間におけるイオン分布とみなすことはできない。t_1 と t_2 とが大きく異なる場合には，実空間における境界面のイオン濃度は，第1層中の方が高いにもかかわらず，エネルギー・スペクトル上では，第2層中に対応した部分の散乱数の方が多いこともある。

つぎに，測定系の分解能が，分散 $\langle \Delta E_r \rangle^2$ を持つガウス分布で表わされる場合に，後方散乱スペクトルが，どのように変化するかを考える。

このためには，式(7.7)～(7.10)で表わされる2つのガウス分布の一部を，それぞれ，測定系の分解能でぼかし，その和の分布を求めれば良い。1個の後方散乱イオンに対するエネルギー分布確率関数 $F(E)$ を次式に示す。

$$F(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sqrt{\langle \Delta E_r \rangle^2 + \langle \Delta E_1 \rangle^2}} e^{-\frac{(E - \langle E_1 \rangle)^2}{2(\langle \Delta E_r \rangle^2 + \langle \Delta E_1 \rangle^2)}} \operatorname{erf}\left(\frac{E_I - \langle E_{t1} \rangle}{\langle \Delta E_{t1} \rangle}\right)$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sqrt{\langle \Delta E_r \rangle^2 + \langle \Delta E_2 \rangle^2}} e^{-\frac{(E - \langle E_2 \rangle)^2}{2(\langle \Delta E_r \rangle^2 + \langle \Delta E_2 \rangle^2)}} \left\{1 - \operatorname{erf}\left(\frac{E_I - \langle E_{t2} \rangle}{\langle \Delta E_{t2} \rangle}\right)\right\}$$

(7.11)

$$\langle E_{ti} \rangle = \frac{\langle E_i \rangle \langle \Delta E_r \rangle^2 + E \langle \Delta E_i \rangle^2}{\langle \Delta E_r \rangle^2 + \langle \Delta E_i \rangle^2} \qquad (7.12)$$

$$\langle \Delta E_{ti} \rangle^2 = \frac{\langle \Delta E_r \rangle^2 \langle \Delta E_i \rangle^2}{\langle \Delta E_r \rangle^2 + \langle \Delta E_i \rangle^2} \qquad (7.13)$$

ここで $\mathrm{erf}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{x} e^{-\frac{t^2}{2}} dt$ である。

また，式(7.11)で与えられるエネルギースペクトルから，イオンの空間分布 $f(z)$ を求めると，以下のようになる。

$$0 \leq z \leq d \qquad f(z) = \frac{F(z/t_1)}{t_1} \qquad (7.14)$$

$$z > d \qquad f(z) = \frac{F\left(\frac{d}{t_1} - \frac{d-z}{t_2}\right)}{t_2} \qquad (7.15)$$

式(7.11)を実験値と比較した結果を図7-13に示す。同図は，460 Åの SiO_2 の付いたSi基板中に，50 keVで打込まれたArイオンからの後方散乱スペクトルを示している。同図に実線で示した理論値は，7.3.2で述べたイオン分布の平均値および標準偏差，，図7-10，7-11から求まる SiO_2 中および Si 中の t_1, t_2 の値*，および測定系の分解能（$\langle \Delta E_r \rangle$ = 10 keV）から，式(7.11)を計算し，その結果に，実験的に求まる後方散乱数を掛け，さらに pile up yield を加えたものである。

測定系の分解能が十分高い場合には，境界面において，12%程度の後方散乱数の段が予想されるが，本実験の測定条件では，イオン分布の広がりに対して，測定系の分解能が十分高くないために，同図に示すように，理論的に予想される後方散乱スペクトルは，ほぼ連続とみなせるスペク

* 図7-13の測定条件においては SiO_2 中および Si 中で 1ch. に相当する距離は，それぞれ，54.5 Å，58 Åとなった。

トルとなる。

また，実験的に求まる後方散乱スペクトルは，全体に 0.5 ch. 程度高エネルギー側に表われているが，スペクトルの形状は，理論的予想と良く一致することが示された。なお，理論と実験との 0.5 ch. 程度のずれは，測定系の変動のために，実際の測定時における Ar surface の位置が，図7-10から求まる位置とずれたためと考えることができる。

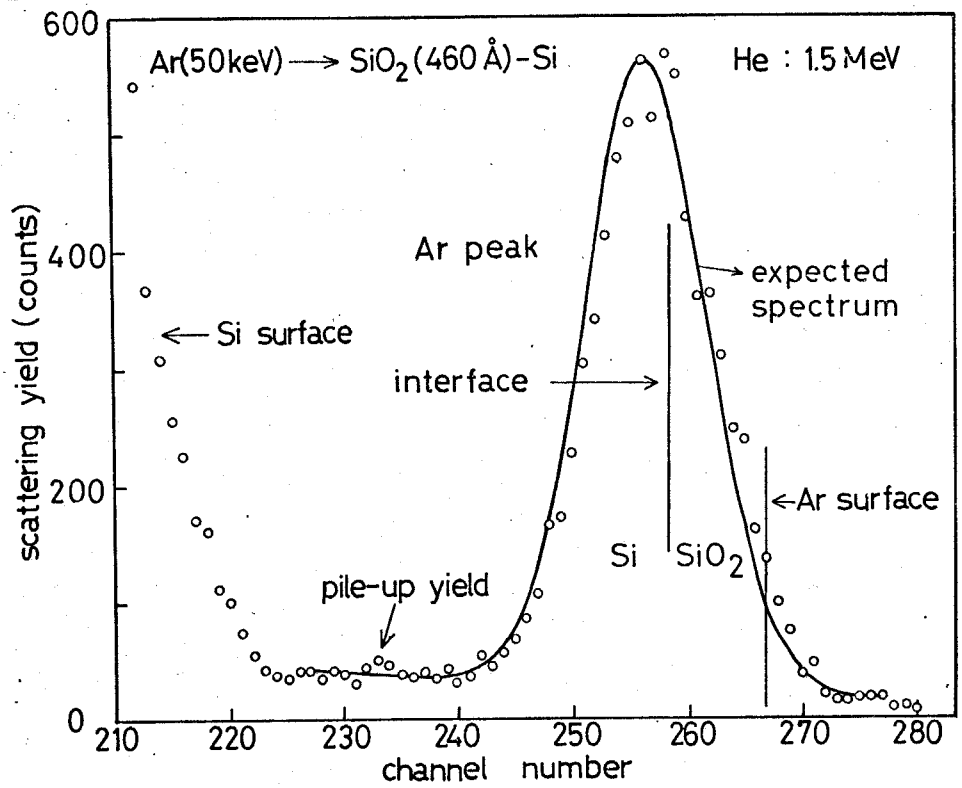


図7-13　SiO_2-Si 基板中の 50keV Ar イオンを測定した後方散乱スペクトル。理論値に用いた pile up yield は，235～240ch. および，273～278ch. の pile up 量を，最小2乗法を用いて直線で近似したものである。

7.4.3 2層構造基板中の注入イオン分布

本項では、前項で求めた式（7.14），（7.15）を用いて，SiO_2-Si基板中のArイオンの空間分布を求め，実験値と比較する。

図7-13のエネルギースペクトルから、pile up量を差し引き、Arイオンによって後方散乱されたと考えられるイオン数で規格化した場合のSiO_2-Si基板中のArイオン分布を、図7-14に示す。同図には、5.2.2で述べた方法によって求まる理論値（実線），および，式（7.14），（7.15）から求まる測定系の分解能を考慮した場合の理論値（破線）が同時に示されている。

同図より、測定系の分解能が十分高い場合には（実線），Si中のイオン濃度の方が高く観測されるが、測定系の分解能が十分高くない場合には（破線），見かけ上，SiO_2中のイオン濃度のほうが高く観測されることがわかる。これは、Si中における1ch.に相当する距離と，SiO_2中で1ch.に相当する距離とが異なっているためであり、エネルギースペクトルが、式（7.11）のように連続関数となる場合には、1ch.に相当する距離が短かいSiO_2中の方が見かけ上イオン濃度が高く観測される。

また，同図の実験結果は、測定系の分解能を考慮した場合に理論的に予想されるイオン分布と良く一致し、SiO_2-Si基板中のイオンの射影飛程分布が図5-5に示す方法で合成できることが示された。さらに，このことから、この合成法の物理的背景となっている多層構造基板の層の境界面でイオンのエネルギー分布が連続するという仮定も、ほぼ妥当であると結論できる。

同様な測定を，SiO_2層の厚みが異なっている基板について行なった結果を図7-15，7-16に示す。同図は、それぞれ、SiO_2層の厚みが335Å

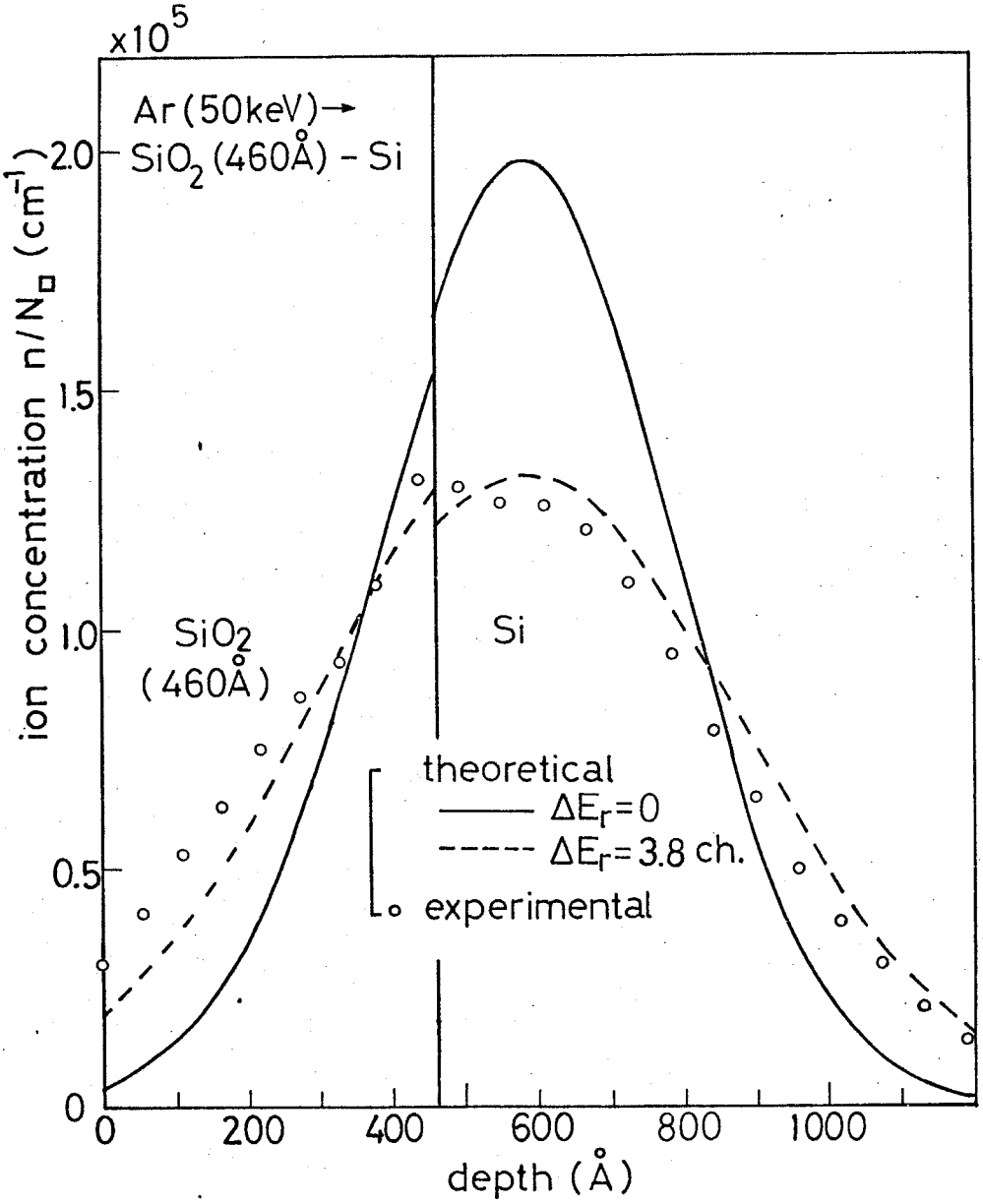


図 7-14　SiO_2(460 Å)-Si 基板中の Ar イオン分布。実線は測定系の分解能が十分高い場合に観測されるイオン分布を示し，破線は，測定系の分解能として妥当と考えられる値を用いて，理論値がどのように観測されるかを予想して示したものである。

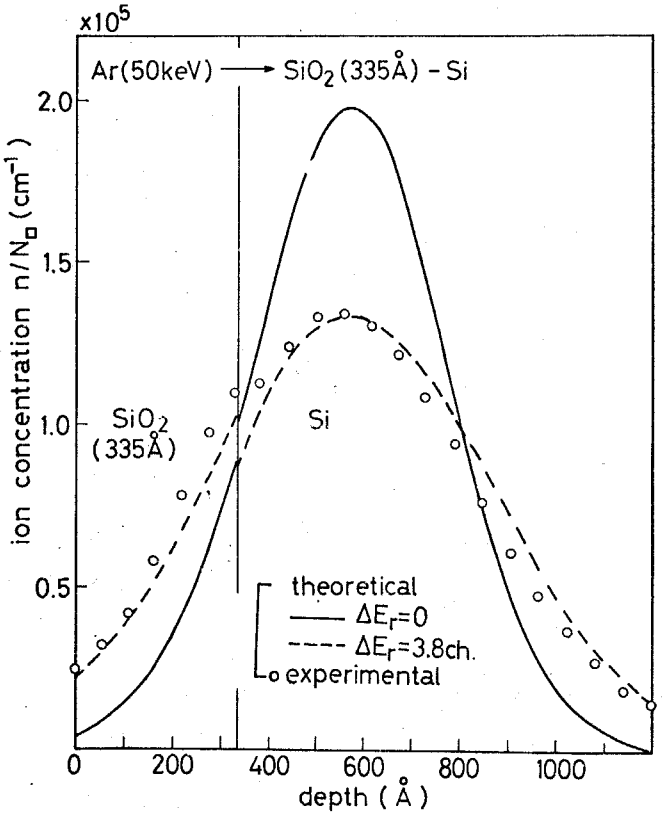


図7-15
SiO_2 (335Å) - Si
基板中のArイオン分布

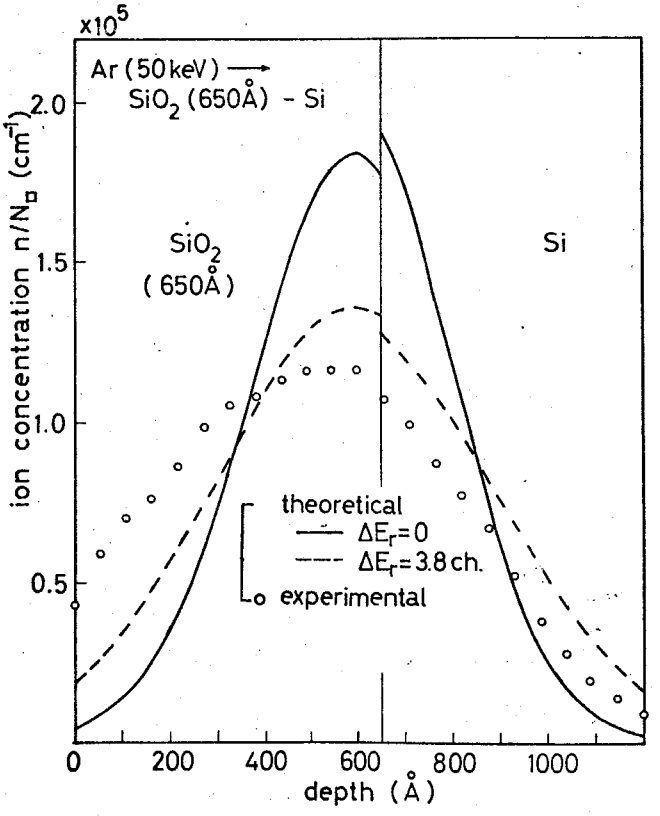


図7-16
SiO_2 (650Å) - Si
基板中のArイオン分布

および650Åの場合の結果である。

同図より、SiO_2層の厚みが335Åの場合には、実験値と理論値とは良く一致しており、SiO_2層の厚みが異なっている場合にも、図5-5に示す方法で、2層構造基板中のイオン分布が予測できることがわかる。

また、SiO_2層の厚みが650Åの場合には、実験的に求まる分布は理論的予想とは一致せず、その原因は十分明らかではないが、分布の形状が理論値と大きく異なっているのは、SiO_2層の表面付近であり、SiO_2とSiとの境界面付近では、破線で示した理論的予想と良く一致した形状が得られている。したがつて、このような不一致は、2層構造基板中のイオン分布に関する理論的検討が正しくないために生じているのではなく、何らかの他の原因によつて生じていると結論できよう。

すなわち、図7-15, 7-16より、SiO_2層の厚みが異なつている場合にも、図7-14に関連して述べた結論がほぼ妥当であることが示された。

なお、本実験においては、層の境界面で付くと予想されるイオン濃度の段に関しては、十分明らかにすることができなかつた。この原因としては、理論的に予想されるイオン濃度の段がいさいために、測定系の分解能が十分高くないこと、および、統計誤差による後方散乱数のばらつきがあることの影響を強く受けたことがあげられる。

境界面付近の分布をより正確に求めるための実験条件については次節で検討する。

7.5 測定系の分解能の影響を減らすための実験条件

前節においては、測定系の分解能を考慮することによりSiO_2-Si基板中のArイオン分布が、章5の理論的予想と一致することを示した。しかしながら、境界面で付くと予想されるイオン濃度分布の段に関しては、実験的に十分に明らかにすることはできなかった。

この原因としては、まず基板の問題として、陽極酸化で形成したSiO_2層は溶融石英に比べて比重が約50%小さいために、理論的に予想されるSiO_2中のArイオンの標準偏差が、章5で溶融石英を仮定して求めた値よりも約50%大きくなり、Si中におけるArイオンの標準偏差と同程度になることがあげられる。このように標準偏差の値が、ほぼ一致している場合には、章5の結果より、層の境界面で十分大きな濃度分布の段が得られないと予想される。

つぎに測定系の問題としては、測定系の分解能が十分高ければ、上に述べた基板についても、濃度分布の僅かな段を検出することが可能と考えられるが、本実験においては測定試料中のイオンの空間分布の広がりが十分大きくないために、境界付近のAr原子で散乱されたHeイオンに対応したパルスに、測定系の雑音パルスが重畳し、第1層からの情報と、第2層からの情報とが交錯して、境界付近のAr原子分布を正確に求めることができなかった。

本節では、このような測定試料および測定系に関する問題点について検討を行ない、多層構造基板中のイオン分布とくに、境界面付近の分布を、Heイオンの後方散乱法でより正確に求める実験条件について考察を行なう。

まず、基板については、1000Å程度の膜を均一に製作することが必要であるため、金属の蒸着によって表面層を形成することは、均一性の点から不適当と考えられる。したがって、酸化あるいは、CVDなどの半導体製作

技術によつて表面に絶縁膜を形成することを考える。

これらの絶縁膜としてはSiO_2, Al_2O_3, Si_3N_4 が最も一般的であり、これらの3種の物質に打込まれたイオン分布の平均値および標準偏差は、章5で述べたように、各々の物質の比重で規格化した場合には、ほぼ一致する。したがつて、これらの基板のうち、最も比重の大きいものと最も比重の小さいものとを組合せた場合に、境界面のイオン濃度分布の段が最も大きくなると予想される。

現在報告されている、酸化あるいはCVDで製作した膜の比重は、最も大きいのがCVDで製作されたAl_2O_3 の3.0[162]であり、また最も小さいのは、本実験で測定した陽極酸化SiO_2の1.8である。したがつて、Siを陽極酸化してSiO_2を製作し、その上にCVDによりAl_2O_3を成長させた基板にイオン注入を行ない、Al_2O_3-SiO_2境界面におけるイオン濃度分布を測定することにより、約40%のイオン濃度の変化が期待できる。

このイオン濃度の変化は、SiO_2の比重がSiよりも小さいために、Al_2O_3-Si基板よりも大きく、通常の半導体製作技術によつて製作可能な基板としては、最も大きなイオン濃度の変化を持つ基板といえる。

つぎに、Al_2O_3 および SiO_2中のイオン濃度分布をHeイオンの後方散乱法で測定するためには、Al_2O_3 および SiO_2 中のHeイオンのエネルギー損失の割合を知る必要がある。

SiO_2中のHeイオンのエネルギー損失の割合は、本実験に用いた値がすでに求まつており、Al_2O_3中のHeイオンのエネルギー損失の割合も、相対値が実験的に報告されている。[162] 図7-11に示したAl_2O_3中のHeイオンのエネルギー損失の割合は、報告されている相対値を実験結果に基づいて、絶対値に変換したものである。

同図の値に基づいて、Al_2O_3-SiO_2基板中のArイオン分布を1.5MeVのHeで測定した場合のスペクトルを予想すると、1ch.が2.5keVの場

合には、Al_2O_3, およびSiO_2中で1ch.に相当する距離はそれぞれ37Å, 52Åとなる。したがって、各々の基板中における1ch.に相当する距離と, 各々の基板中のイオン濃度分布とから、測定系の分解能が十分高い場合に境界面で付くと予想される後方散乱数の段を理論的に予想すると、後方散乱数はAl_2O_3中のほうが約16%高くなる。

しかしながら, 本実験においても, 測定系の分解能が十分高ければ, Si中と, SiO_2中とにおけるHeイオンのエネルギー損失の割合の違いによって, 境界面で12%程度の後方散乱数の段が付くと予想されたことを考えると, 本実験と同一な測定条件では、この16%という後方散乱数の変化は必ずしも十分ということはできない。

したがって、以下, 測定系の分解能の影響を相対的に少なくする実験条件について考察を行なう。

測定系の分解能自身を高くする方法としては、半導体検出器を用いずに、磁界によって後方散乱イオンのエネルギーを測定する方法があるが、1ch.ごとの後方散乱数を測定することになるため、測定時間が何10倍にもなり、実際上困難である。一方、半導体検出器を用いた場合には, 本実験に用いた値よりも1桁程度分解能を上げることは不可能といって良く、最も条件の良い場合でも、5keV程度の標準偏差を避けることはできない。

したがって、半導体検出器を用いた実験で、測定系の分解能の影響を相対的に小さくするためには、不純物原子の空間分布を広くすることが必要になる。注入イオンの空間分布を広げるためには、打込みイオンの質量を軽くし、打込みエネルギーを大きくすれば良い。

しかしながら、7.3.2.で述べたように、SiO_2, あるいはAl_2O_3基板の場合にはArイオンよりも軽いイオンを打込んだ場合には、Heイオンの後方散乱法ではその空間分布を測定することができない。また、Arイオン

の場合にも，図ク－9から明らかなように、打込みエネルギーを100keV以上にすると、分布の深い部分で散乱されるイオンのエネルギーが、Si原子によって散乱されるイオンのエネルギーと重なってしまい、深い部分の分布を測定することができなくなる。

このような条件を考え合わせると、例えば、最大電圧200kVの加速器でイオン注入を行なう場合には、Arイオンを100keVで注入してその分布を測定するよりは、Arよりも質量が大きく、したがって、同じ深さで散乱された場合にも後方散乱エネルギーが高い不純物原子，例えば，Fe，Cuなどのイオンを200keVで注入したほうが、イオンの空間分布が広がっているために、測定系の分解能の影響を相対的に少なくできると結論できる。図ク－12より，50keVでArイオンをSi基板中に注入した場合には、測定系の分解能の影響により、最大イオン濃度は約30%減少していることがわかるが、200keVでFeイオンを注入した場合には、同一の分解能を仮定した場合の最大イオン濃度の減少は、約8%であり、測定系の分解能の影響は著しく改善されることがわかる。したがって、このような条件でAl_2O_3－SiO_2基板にイオン注入を行なった場合には、境界におけるイオン濃度分布に関する定量的な検討を行なうことが可能と考えられる。

以上の考察より，多層構造基板の層の境界面でイオン濃度分布に段が付くことをHeイオンの後方散乱法で測定するためには、Si基板に陽極酸化でSiO_2層を2000Å程度形成し，その上にCVDによりAl_2O_3膜を1000Å程度*成長させた基板に，Feあるいは，同程度の質量を持つイオンを200keV程度のエネルギーで打込んだ試料を用いるのが最も適当であることが明らかとなった。

---

* 200keVのFeイオンのAl_2O_3中における平均射影飛程は約1060Åである。

7.6 本章のまとめ

本章では、Heイオンの後方散乱法を用いて、2層構造基板中に打込まれたイオンの射影飛程分布を求め、以下の結論を得た。

(1) Heイオンの後方散乱法を用いた測定から、陽極酸化法で製作したSiO_x層の組成はSi:O=1:2.07となり、ほぼSiO_2とみなせること、また、その比重は約1.8となることを示した。また膜厚を変化させて、同様な実験を行ない、SiO_2層の膜厚が500Å以下の場合には、測定系のエネルギー分解能が十分高くないために、正確な比重が得られなくなることを明らかにした。

(2) 測定系のエネルギー分解能は、Au薄膜を用いた測定では標準偏差が約7.9keVとなるが、実際のイオン分布を測定した結果からは、標準偏差を約10keVと仮定したほうが妥当なことを示し、この違いの原因の1つとして、基板中のHeイオンのエネルギー損失の割合にばらつきがあることが考えられることを示した。

(3) HeイオンのSiO_2中およびSi中におけるエネルギー損失の割合を考慮すると、SiO_2-Si基板に50keVで打込まれたArイオン分布のエネルギースペクトルは、エネルギー分解能が十分高い場合には、境界面において12%程度Si側のほうが高いことが予想されるが、結論(2)による分解能を考慮すると、ほぼ連続とみなせるスペクトルになることを示した。

(4) 測定されたArイオン分布は、SiO_2層の厚みが335Åおよび460Åの場合には、測定系のエネルギー分解能を考慮した理論結果と良く一致することを示し、SiO_2-Si基板中のイオン分布がSiO_2単一層基板中のイオン分布と、Si単一層基板中のイオン分布との合成によって表現できるという理論解析結果，および，その物理的背景となっている多層構造基板中の層の境界で、イオンのエネルギー分布が連続するという仮定の妥当性を明らかにした。

(5) 層の境界面付近におけるイオン分布が、十分正確に得られなかった原因について考察を行ない、Heイオンの後方散乱法によって、2層構造基板の境界付近の注入イオン分布を精度よく測定するための試料としては、Al_2O_3-SiO_2基板にFeイオンを200keVで注入した試料が最適であることを示した。

Heイオンの後方散乱法によって、不純物原子分布を求める場合には、いままでに述べた測定系の分解能の問題の外に、Heイオンの基板中におけるエネルギー損失の割合が、十分正確に求まっていないことも大きな問題である。とくに、Heイオンが単結晶中でチャンネリング効果を起している場合に、どのようなエネルギー損失を受けるかについては、全く未解決な問題といって良い。

本実験においてもpile up量を減らすために、チャンネル軸方向からArイオン分布を測定した場合に，後方散乱スペクトルが変化するという結果が得られた。そのスペクトルの変化から、チャンネル効果を起している場合のHeイオンのエネルギー損失の割合を推定し、その値を用いてSiO_2-Si基板中のArイオンの空間分布を求めると，Si中のイオン濃度が，本章の結果よりも低くなることが示された。この違いに関しても現在未解決な問題として残されている。

第8章 格子欠陥のアニール特性に関する実験的検討

イオン注入の際に発生する格子欠陥の空間分布は、章6の解析により明らかとなったが、章6の解析は、格子点を外れた基板原子が、再び、格子点に戻る確率を考慮に入れていないので、アニール処理により、格子欠陥分布がどのように回復するかという問題は議論することができない。

格子欠陥の消滅に関する研究は、Si中の一様な点欠陥に関しては、その種類および消滅温度などが、かなり詳しく調べられているが、[175] イオン注入を行なった場合のように、欠陥が局所的に高密度に存在する場合には、単純なモデルを用いて解析することが難しく理論的検討は、基板が非晶質となる限界の打込み量の基板温度依存性を検討したもの[178]以外は皆無である。

一方、実験的には、イオン注入法により導入された不純物原子の増速拡散現象や[143],[145]キャリアの逆アニール現象は、[20],[136],[165] 格子欠陥の回復特性と密接に関係していることが知られているが、詳細に関しては、物理現象の不明な点も多く、格子欠陥の回復特性に関する研究は、半導体素子製作上からも欠かすことのできない問題である。

一例として、Bイオンの逆アニール現象は、格子欠陥量が一定の条件を満たす場合に、置換位置を占めるB原子が、減少するために起る現象であることが知られているが、[7],[137],[138] この現象が、格子欠陥量が一定の条件を満たす場合には、打込みイオンの種類によらずに常に観測される現象であるのか、あるいは、欠陥の回復過程で、欠陥と特定のイオンとが結びついて起る現象であるのかについては明確ではなく、現在のところ、打込みイオンの種類を変えた場合の最適アニール温度を予測することはできない。

本章では、この逆アニール現象の問題を含めて、イオン注入の際にできる格子欠陥の回復特性が、打込まれたイオンの種類により、どのように変化するかを実験的に検討することを目的としている。

格子欠陥の測定方法としては、表8-1に示すように、種々の方法があるが、本章の検討は、測定感度はそれほど高くはないが、最も定量的な検討を行なうことができるチャンネリング効果を利用したHeイオンの後方散乱法を用いて行なった。また、同時に、電気的性質のアニール特性を測定し、格子欠陥のアニール特性との対応を試みた。

測定法	打込み量 (cm^{-2})	特長	文献
電子顕微鏡	$>10^{14}$	欠陥の2次元的形状が観察できる。点欠陥の測定は困難である。	(136) (211)
ESR	$>10^{13}$	欠陥の種類が判別できる。	(215) (216)
X線回折	$>10^{13}$	格子定数の変化が測定できる。	(209)
光学吸収 反射率	$>10^{11}$	欠陥の種類が判別できる。	(207) (208) (214)
電気抵抗	10^{12} ～ 10^{14}	測定が容易である。	(212) (218)
少数キャリア寿命	$>10^{11}$	測定感度が高い。	(22) (219)
荷電粒子のチャンネリング効果	$>10^{13}$	エッチングを行なうことなく欠陥の深さ方向の分布が測定できる。	(15), (186) (188), (189) (181), (182)
応力測定	$>10^{11}$	測定感度が高い。	(205) (206)
不純物原子のデコレーション	$>10^{13}$	放射化分析を行なうことにより高い空間分解能が得られる。	(213) (217)

表8-1　半導体中の格子欠陥の測定法

8.1 チャンネリング効果を用いたHeイオンの後方散乱法

格子欠陥分布の測定

2.3 で述べたように、単結晶基板の低指数の結晶軸に平行にイオンを入射すると、チャンネリング効果が起り、その結果、表面付近で後方散乱される確率は、ランダム方向から入射した場合の3%程度にまで減少する。

表面付近に格子欠陥がある場合には、チャンネリングしているイオンが、置換位置を外れた基板原子と衝突する確率が高くなり、入射イオンの方向をチャンネル軸に合わせても、結晶が完全な場合ほどは、後方散乱されるイオン数は減少しない。 完全結晶、および、格子欠陥の存在する結晶を用いた場合に得られるエネルギースペクトルを図 8-1 に示す。

同図(b)に示されているように、格子欠陥が存在する領域を通過後に、格子欠陥のない領域で散乱されるイオン数(同図(b)の低エネルギー部分の散乱数)は、同図(a)に示されている完全結晶の場合の値にまで減少しない。したがって、エネルギー分布から、格子欠陥の空間分布を求める場合に、式(7.3)を用いて、エネルギーを距離に変換しただけでは、格子欠陥分布を求めることができず、格子欠陥分布を定量的に求めるためには、イオンのディチャンネリング機構を考慮した解析が必要となる。[181],[182],[183],[204]

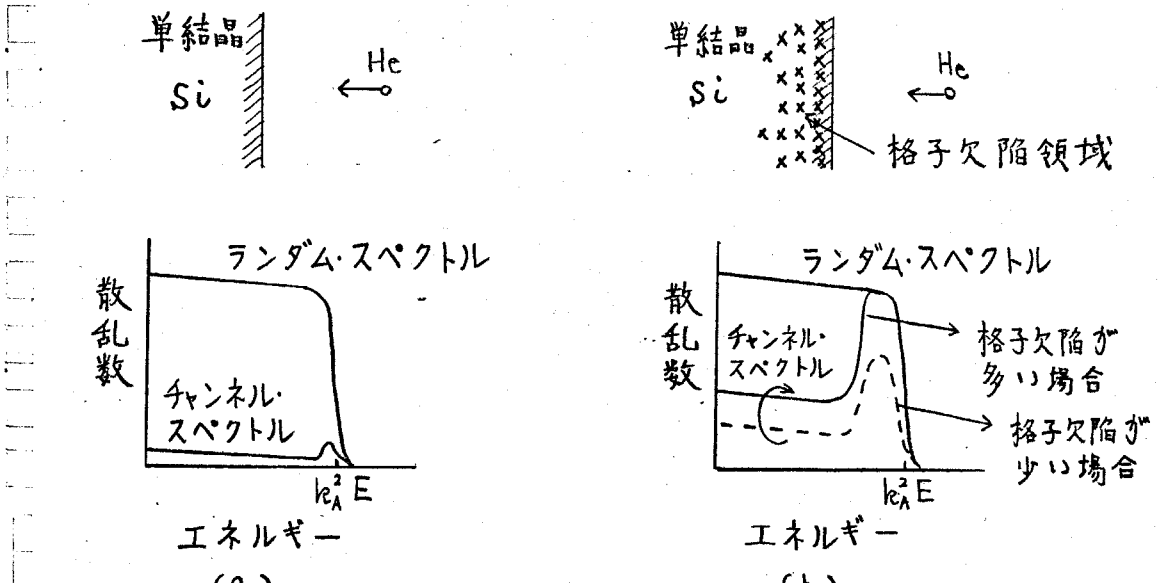


図 8-1 完全結晶および格子欠陥の存在する結晶からの後方散乱スペクトル

本研究は，格子欠陥量のアニール特性を測定することを，第1の目的としており，欠陥分布に関する定量的な解析は行なわない。

不純物原子の格子位置決定 (7), (133), (137), (138), (164), (192)

チャンネリング効果を用いた後方散乱法により、不純物原子の格子位置を決定する方法を、ダイアモンド構造結晶について示したのが図8-2である。同図（a）は（110）面の格子点を示しており、同図に白丸で示したテトラヘドラルな格子間位置にある不純物原子は、<111>軸および<001>軸からのチャンネリングを行なう場合には、置換位置を占める基板原子の陰になって、イオンの後方散乱には寄与しないが、<110>軸に平行にイオンを入射した場合には、不純物原子はチャンネル領域内に存在することになり、この場合には後方散乱数が増加する。

したがって、同図（b）に示すように、(1)ランダム方向，(2)<110>軸方向，(3)<111>軸方向，あるいは、<001>軸方向の、3方向から不純物原子の後方散乱スペクトルを測定すると、置換位置を占める原子の割合、格子間位置を占める原子の割合、および、それ以外の位置を占める原子の割合が、それぞれ求まる。

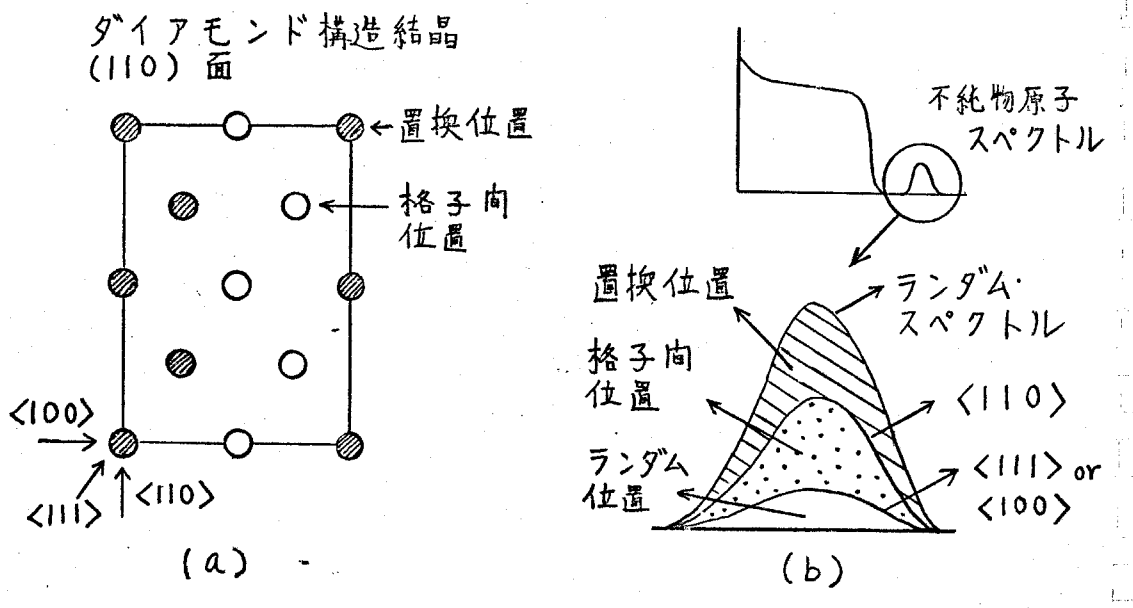


図 8-2　後方散乱法による不純物原子位置の測定

8.2 実験方法および測定試料

8.2.1 実験方法

実験装置は，図7-3に示した装置である。後方散乱スペクトルは，前章と同様に，同図(C)の回路を用いて測定を行なう。ただし，本章では，格子欠陥分布を求めるために，図8-1に示すチャンネルスペクトルを測定する必要がある。チャンネルスペクトル測定のための結晶軸合わせについては，以下に述べる。

本実験では，<111>軸方向からのチャンネルスペクトルを測定し，また，ランダムスペクトルは，多結晶Siを用いて測定した。

測定時のイオン電流は，通常5nA，スペクトル測定のための電荷量は，5μCである。

結晶軸合わせ

結晶軸合わせは図7-3(b)の回路を用いて行なった。同図において，SSDからの出力パルスを，前置増幅器，主増幅器で増幅した後、シングルチャンネルの波高分析器に入れる。シングルチャンネルの波高分析器は、あらかじめ設定された上限および下限の間の波高を持つパルスが入るごとに、一つの出力パルスを出す装置であり、後方散乱されるイオンの総数を知ることができる。

一方，同図の端子3は、電流値の測定端子で、ディジタイザーを用いて、一定電荷量ごとに、1つのパルスを発生させている。したがって、シングルチャンネル波高分析器の出力パルスと、ディジタイザーの出力パルスとを、スケーラーで読むか、あるいは、両者をアナログ量に直して割算を行ない、

結果をレコーダーに記録すると、電流値に対する後方散乱されたイオン数の割合が求まり、電流が変化しても、この比は一定に保たれる。

すなわち、図(b)に示す回路は、一定電流値に対して、後方散乱されるイオン数を測定する回路であり、Heイオンがチャンネリング効果を起して後方散乱されるイオン数が減少した場合には、この比が小さく左るが、電流値が減少しても、この比は変化しない。この回路を用いると、以下のような基板の低指数の軸と、イオンの入射方向とを合わせることができる。

測定に用いたのは、(111)面のSi基板であるから、以下、ダイアモンド構造単結晶の(111)面に、ほぼ平行な面でカットされた基板の〈111〉軸に、ビームを合わせる方法について述べる。この方法は、他の基板、軸の場合にも、ほぼ同様に行なうことができる。

〈111〉軸は、3つの(110)面の交線であることを利用して、まず(110)面を見つける。(110)面は、試料をビームに対して6～8°傾け、さらに試料をビームの回りに回転させることにより、見つけることができる。図8-3に、(110)面を見出す方法を示す。

まず、ゴニオメーターの中心方向をZ軸にとると、試料の取り付け方、および結晶軸の試料鉛直軸からのずれのために、〈111〉軸はZ軸からαだ

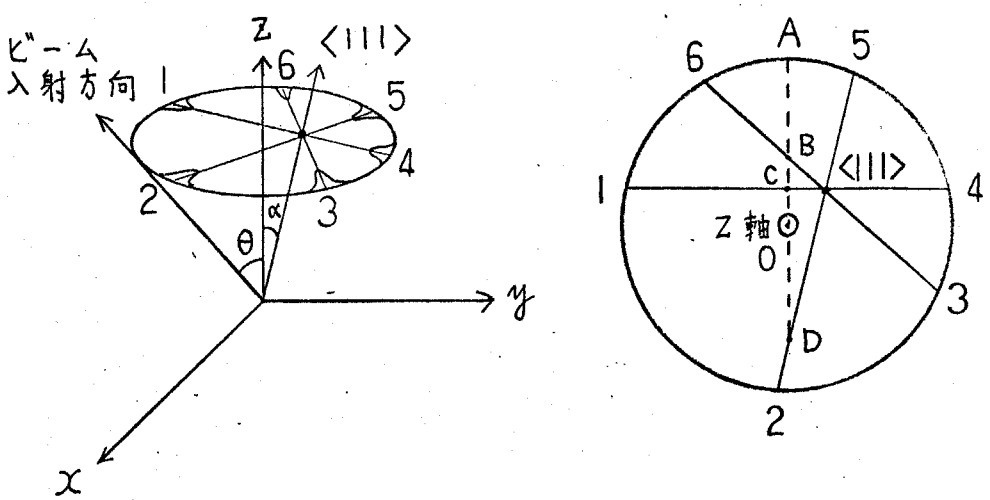


図 8-3　結晶軸合わせの方法（面心立方結晶〈111〉軸）

けずれた方向にある。一方、ゴニオメーターを傾けることにより、ビームの入射方向は、z軸からθ（6～8°）ずれた方向になり、その状態のまま、ゴニオメーターを回転させると、図8-3のようにゴニオメーターに固定した座標の上ではビームは円錐の母線に沿って動くことになる。

そして、ビームが360°回転する間に同図に示す1～6の点で（110）面とビームとが平行になり、面チャンネル効果が起って、後方散乱されるイオン数が減少する。ゴニオメーターをステップモーターにより回転させながら測定したSi単結晶の後方散乱数の変化を図8-4に示す。同図より、（110）面に対応して、大きなディップが得られていることが分る。ディップの表われる間隔はψ＝0の場合には、60°おきであるが、一般には図8-3に示すように、その間隔は必ずしも60°にはならない。

このように、（110）面が求まると、つぎに、向かい合っている2つのディップ位置（図8-3の1-4）に対応するステップ数の平均値から、その中点Aを求め、ビームがAの位置にくるようにゴニオメーターを回転する。この状態で傾き角θを0に戻してゆくと、ビームは、Aから、B→C→O

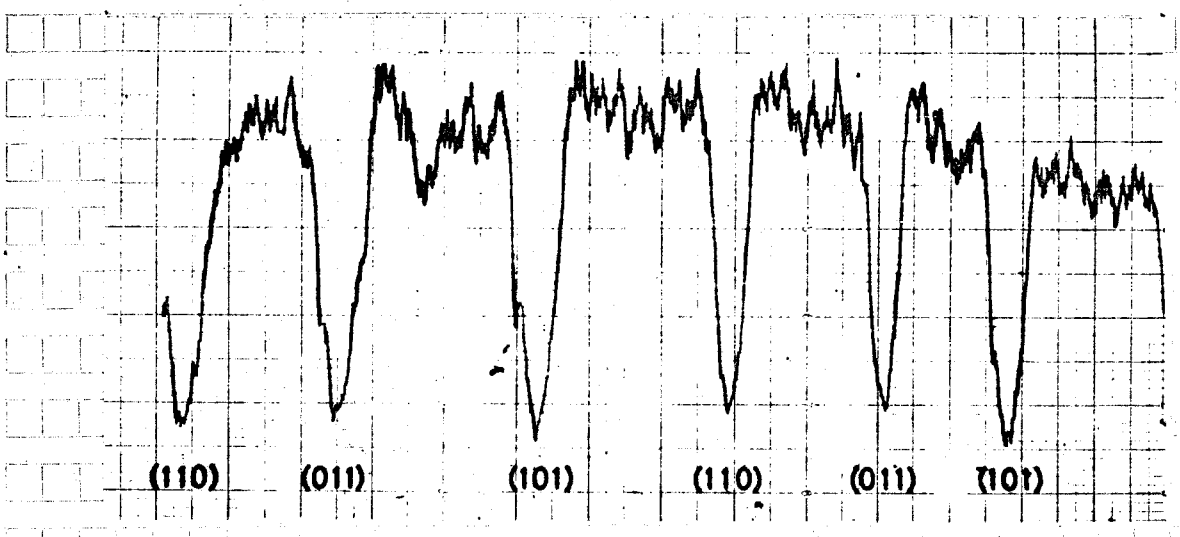


図8-4　ゴニオメーターの回転による後方散乱数の変化。
面と面との中間は，ゴニオメーターの回転速度は4倍になっている。

と進み，さらに，逆方向に回すとD点を通過する。そして、このB、C，Dの各点において、再び（110）面を横切ることになり，図8-4に示すのと同様なディップが、3つ出まる。

この3つの面のうち真中の面，すなわち、C点にビームがくるように、θを固定し、つぎに、ゴニオメーターの，第3番目の軸，すなわち，θと直角方向な軸について試料を傾けてゆくと、ビームは，1—C—4の線上を動くことになり，<111>軸に一致する位置が見つかる。ビームが軸と平行になった場合には、後方散乱されるイオン数が、面の場合よりも、さらに大幅に減少し、面と軸との区別は容易に行なうことができる。

また、1—C—4の（110）面内に沿って<111>軸から約35°傾けると、<110>軸が見つけられる。

本実験では、割算回路の出力を、メーターレコーダーに書かせながら、測定を行なった。また、ビームと軸とを特に正確に一致させる必要のある場合には、2台のスケーラーを用いて、後方散乱数をディジタル量として0.05°おきに求め、結果を内挿して、後方散乱数が最小となる位置を求めた。一枚の試料の結晶軸を合わせるのに必要な時間は約30分間であった。

8.2.2 測定試料

測定に用いた試料の基板はSi，打込みイオンは、質量がほぼ等しく、また電気的性質が全く異なるイオンとして、Al，Si，P および Ar を用いた。

打込みは、すべて室温で行ない、エネルギーは 50keV，打込み速度は 0.1μA/cm² である。基板の種類および、打込み量を表 8-2 に示す。打込み直後の格子欠陥量が、ほぼ等しくなるように、Arイオンの打込み量を少なくしてある。表 8-2 に示した打込み量は、図 6-12 より明らかなように、基板が、ほぼ非晶質となる打込み量である。試料のアニールは、400°C～1000°C まで，50～100° おきに 10分間，窒素雰囲気中で行なった。

ION	ENERGY	DOSE	SUBSTRATE
Al	50 KeV	1.1×10^{15} cm^{-2}	n-Si (>15Ωcm) (111)
Si	50 KeV	1.1×10^{15} cm^{-2}	n-Si (>15Ωcm) (111)
P	50 KeV	1.1×10^{15} cm^{-2}	p-Si (>50Ωcm) (111)
Ar	50 KeV	6.6×10^{14} cm^{-2}	n-Si (>15Ωcm) (111)

表 8-2 格子欠陥のアニール特性測定試料のイオン注入条件

8.3 Heイオンの後方散乱スペクトルの測定

本節では、イオン注入層の格子欠陥のアニール特性をHeイオンの後方散乱法で測定した結果について述べる。

8.3.1 格子欠陥領域のアニール特性

PおよびSi打込み層の格子欠陥のアニール特性を測定した後方散乱スペクトルを図8-5，および図8-6に示す。

図8-5より，(1) $1.1\times10^{15}cm^{-2}$ のP打込みにより、欠陥分布のピークは、ランダムスペクトルまで達しており，欠陥層は非晶質になっていると考えられること，および(2) 500°C 以下のアニールでは、欠陥はほとんど回復せず、500°Cと600°Cとの間に、欠陥の急激な回復過程が存在することがわかる。これらの結論は，文献(180)の結果と良く一致している。

一方、図8-6の，Siイオンを打込んだ層の格子欠陥は、600°Cのアニールにおいては、十分回復しておらず、打込みイオンの種類によって格子欠陥の回復特性が異なることが明らかとなった。

同様な実験をAl，およびAr打込み試料についても行ない，アニール温度に対して、欠陥がどのように変化するかを示したのが図8-7である。図の縦軸は，後方散乱スペクトルのうち、欠陥領域で散乱されたイオン数（図中の斜線で示した面積）を相対的に示したもので、欠陥量の目安を与えるものと考えられる。(10)

同図より、イオン注入時に発生する格子欠陥のアニール特性に関して、下のことがいえる。

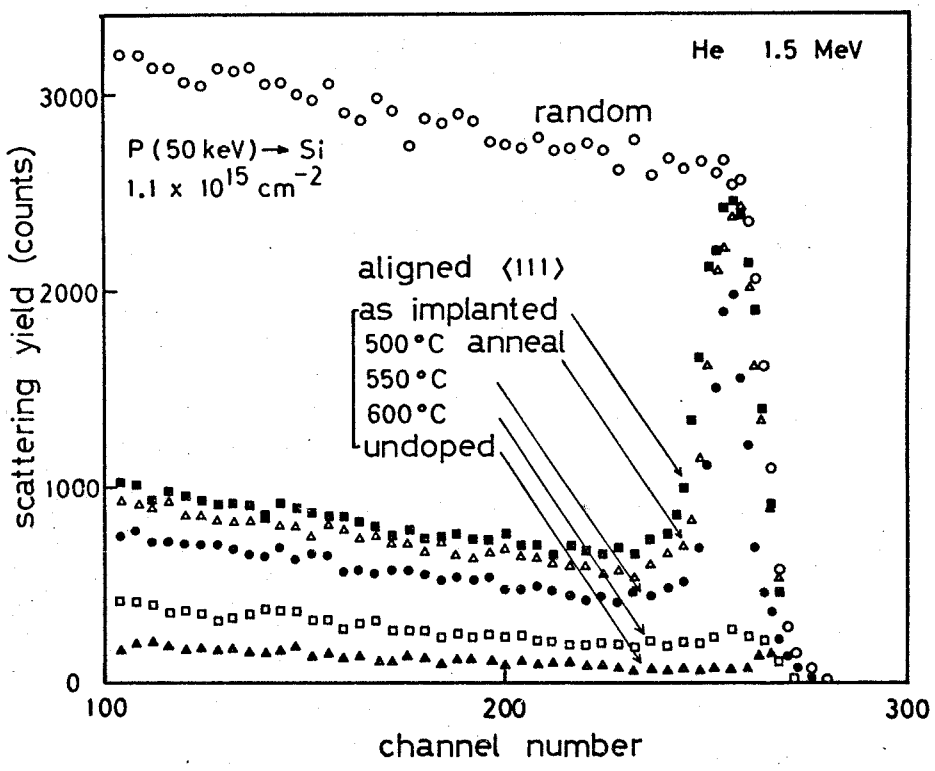


図 8-5　P打込み試料のアニール特性

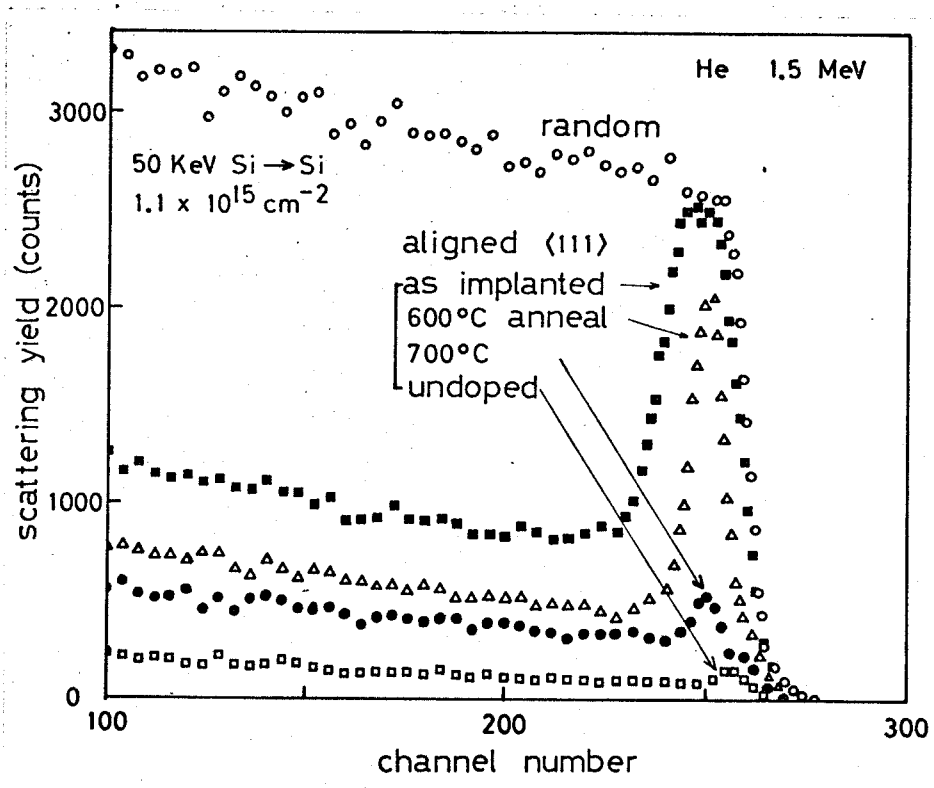


図 8-6　Si 打込み試料のアニール特性

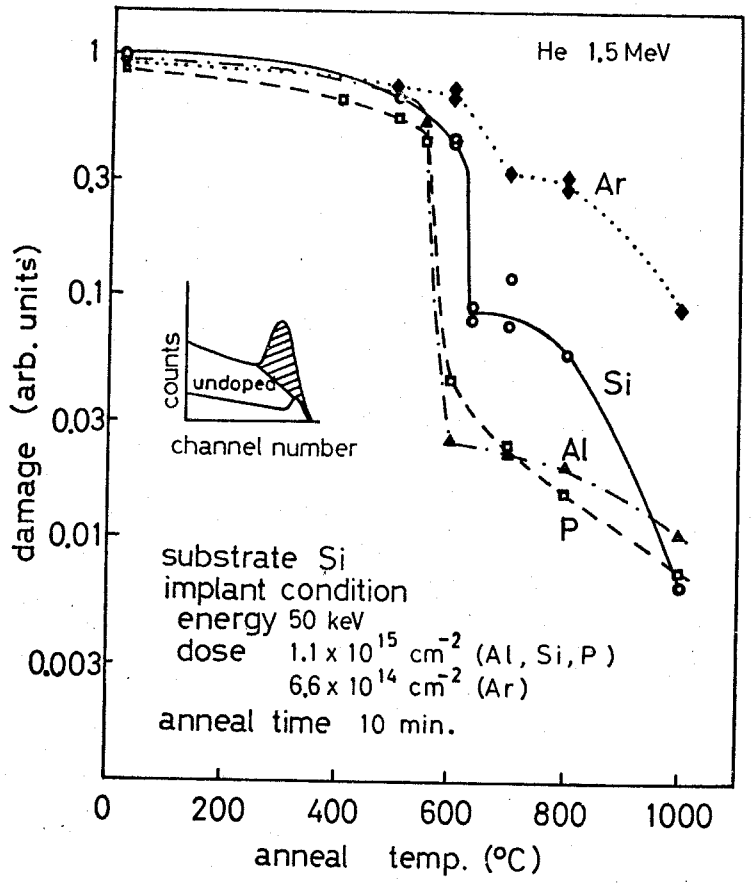


図8-7
イオン注入層の格子欠陥の等時アニール特性
(縦軸は相対値を示す。)

(1) アニールを行なう前の欠陥量は、4つの試料ともほぼ等しく、図8-5, 6のスペクトルから明らかなように、欠陥層は非晶質となっていると考えられる。

(2) Alおよび、Pイオンの打込みによりできる格子欠陥の回復特性は、非常によく一致しており、ともに、550°Cから、600°Cの間のアニールにより、欠陥が急速に回復する。

(3) Siおよび Arイオンの打込みによりできる欠陥は、Al, Pを打込んだ場合よりも高温までアニールされず、Siの場合には、600°Cと650°Cの間で、かなり急速に回復するが、Arの場合には、欠陥が急速に回復する温度が存在せず、1000°Cのアニールにおいても、他の3種のイオンを打込んだ場合に比べ、10倍程度多い欠陥が残る。

Pイオン打込み試料の格子欠陥が、600℃付近のアニール温度で急速に回復するのは、非晶質となった部分がエピタキシャル成長により再結晶化するためと考えられているが、[10] 本実験の結果より、Al, Si を打込んだ場合にも、同様な現象が起っているものと考えられる。また、Arイオンを打込んだ場合には、置換位置に入ることのできないAr原子が数多く存在するため、特定の温度で再結晶化することなく、高温まで欠陥が残るものと解釈できる。

8.3.2 格子欠陥の逆アニール現象

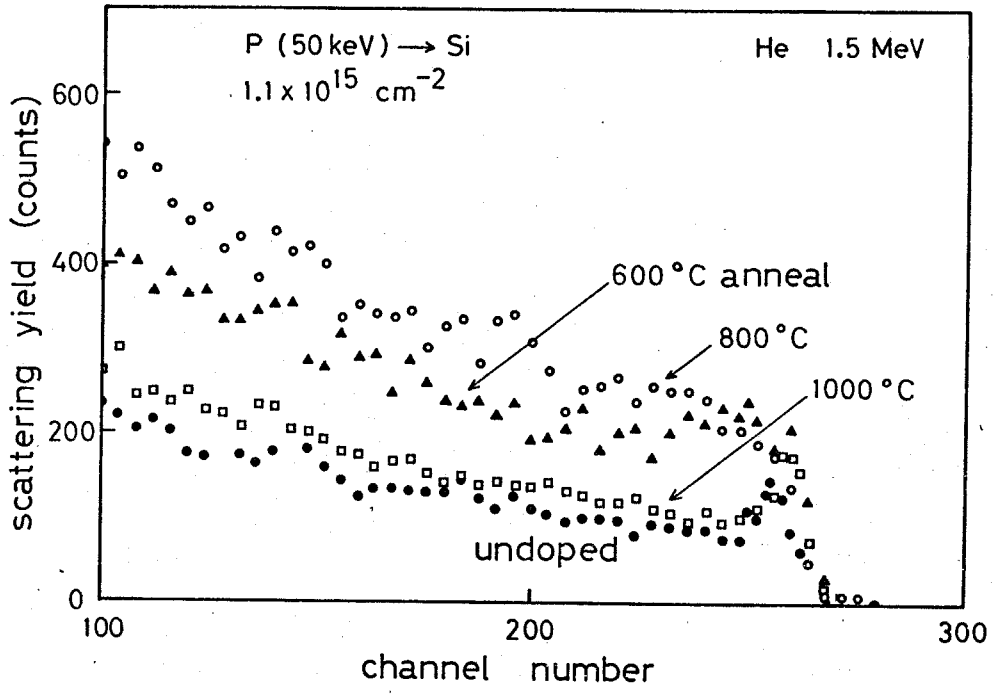
前項の検討は、欠陥領域で散乱されたHeイオンについて行なったものであるが、欠陥が高密度に存在している領域を通過後に散乱されるイオン数も欠陥の回復特性の一つの目安を与えると考えられる。

AlおよびPイオンを打込み、600°C～1000°Cでアニールした試料の後方散乱スペクトルを図8-8(a),(b)に示す。同図により、Alイオンを打込んだ場合の方が、それぞれのアニール温度において、散乱数が約20%多いが、定性的には全く同一の傾向を示し、600°Cと800°Cのスペクトルを比較すると、表面付近の欠陥ピークは、800°Cのアニールにより減少しているが、低エネルギー側のスペクトル、すなわち、表面付近の欠陥領域を通過後に散乱されるイオン数は、800°Cのアニールにより、かえって増加していることがわかる。

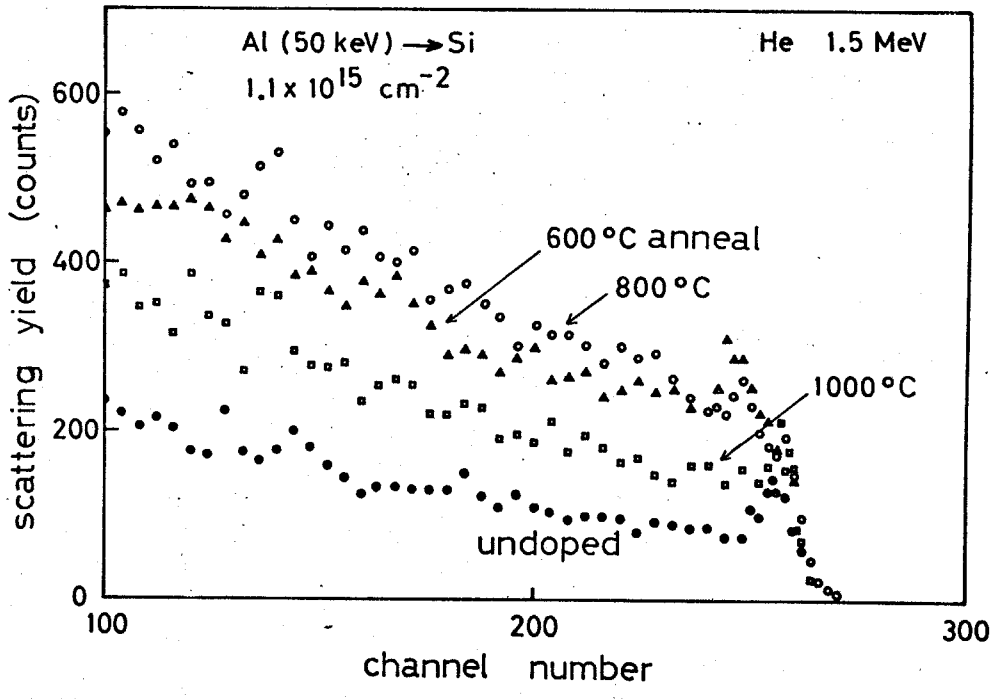
また、同図より、散乱数の増加は観測されたスペクトル全体にわたっていることがわかるが、チャンネル数(エネルギー)と深さとの関係を用いると、散乱数が増加している範囲は表面から1μm以上の深さまでとなる。

このような散乱数の増加の原因としては、(1) ビームと結晶軸とのずれ、(2) 測定ビームにより新たにできる格子欠陥の影響など測定方法に基づく原因も考えられるが、この現象が測定方法に起因するものでないことは、付録Cに示した方法で確かめた。

したがって、同図に示すアニール温度で、物理現象として、後方散乱数が増加すると考えることができる。その原因としては、実際に欠陥が基板の深い位置まで拡散していること、および、表面欠陥領域の歪が増大したために、欠陥領域通過後にディチャンネルする確率が増加したことの2つか



(a) P 打込み試料の場合



(b) Al 打込み試料の場合

図 8-8 格子欠陥の逆アニール現象を示す後方散乱スペクトル

考えられる。

まず第1の原因の可能性を考えると、Alをイオン注入した場合に、Al原子が5000Å以上異常拡散すること[144]および、Pをイオン注入した場合にも指数的に減少する分布の尾が存在すること[154]は、すでに報告されており、欠陥についても1mm程度拡散する可能性は存在する。しかしながら、図8-8から明らかなように、後方散乱スペクトルは、全体が一様に増加しており、表面から深くなるにしたがって、欠陥が減少する傾向が見られない。したがって、散乱数が増加する原因は、2番目に考慮した表面欠陥層の歪の増大によるものと考えられる。

この推論の妥当性を示す一例として、イオン注入層の格子定数変化を測定した結果を図8-9に示す。[209] 同図は、B, Siおよびイオンを、それぞれ、$1\times10^{16}cm^{-2}$, $1\times10^{15}cm^{-2}$, $1\times10^{16}cm^{-2}$ 注入した試料の歪を、X線回折で測定したもので、縦軸は試料の曲率半径を示している。同図の測定は、Pイオン（図中にPで示されている）の打込み量が、本実験に用いた

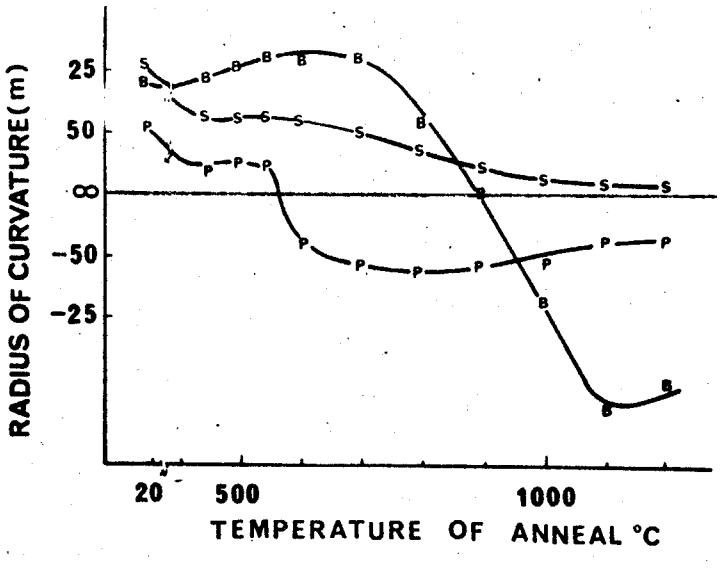


図8-9 イオン注入層の歪の測定。B, S, Pはそれぞれ B, Si, P 打込み試料を示す。

打込み量よりも約10倍多いが、600°C以上のアニール特性に着目すると、800°Cのアニール温度で試料の歪みが最も大きくなっていることがわかる。このことからも、800°Cアニールにおいて、表面欠陥層の歪が増大し散乱数が増加するという推論は妥当といえよう。いずれにしても、後方散乱法で測定した場合に、アニール温度を上昇させると、後方散乱数が増加するという現象が観測され、格子欠陥に関して、ある種の逆アニール現象が存在することが明らかになった。

なお、図8-8より、非晶質層が形成される程度の打込み量の場合には、後方散乱法で測定される散乱中心が、1000°Cのアニールによっても消滅しないことがわかる。

8.4 電気的性質のアニール特性との比較

本節では、前節までに測定した格子欠陥分布のアニール特性と、電気的性質のアニール特性との比較を、電気的性質を測定することのできるAl, およびPイオン打込み試料について行なう。

8.4.1 電気的性質の測定方法および測定試料

打込み層の電気的性質は、Pイオンおよび Alイオン打込み試料について、van der Pauw法を用いて、ホール定数と抵抗率とを測定した。

ホール・パターンの製作法を図8-10に、製作されたパターンを図8-11に示す。van der Pauw法の測定において、必要な試料の形状としては、測定電極が試料に比べて十分小さく、かつ試料の端面に位置していることであるので、同図の試料はそのような条件を満足していると考えることができる。

シート抵抗 ρ_S の測定は、同図の電極 1→2 間, 2→3 間に直流電流Iを流すとき、電極 3−4 間, および 4−1 間に発生する電圧 $V_{12,34}$, $V_{23,41}$ を測定し、次式によって求められる。(220)

$$\rho_S = \frac{\pi}{\ln 2} \cdot \frac{V_{12,34} + V_{23,41}}{2I} \cdot f \qquad (8.1)$$

ここで、f は $V_{12,34}/V_{23,41}$ の関数であるが、図8-11に示すように試料の構造が対称的で $V_{12,34} \approx V_{23,41}$ のときは $f=1$ となる。

シート・ホール係数 R_S は、電極 2→4 間に電流Iを流している状態で、試料に垂直に磁場Bを印加するとき、端子 1−3 間に表われる電圧 $V_{24,13}$

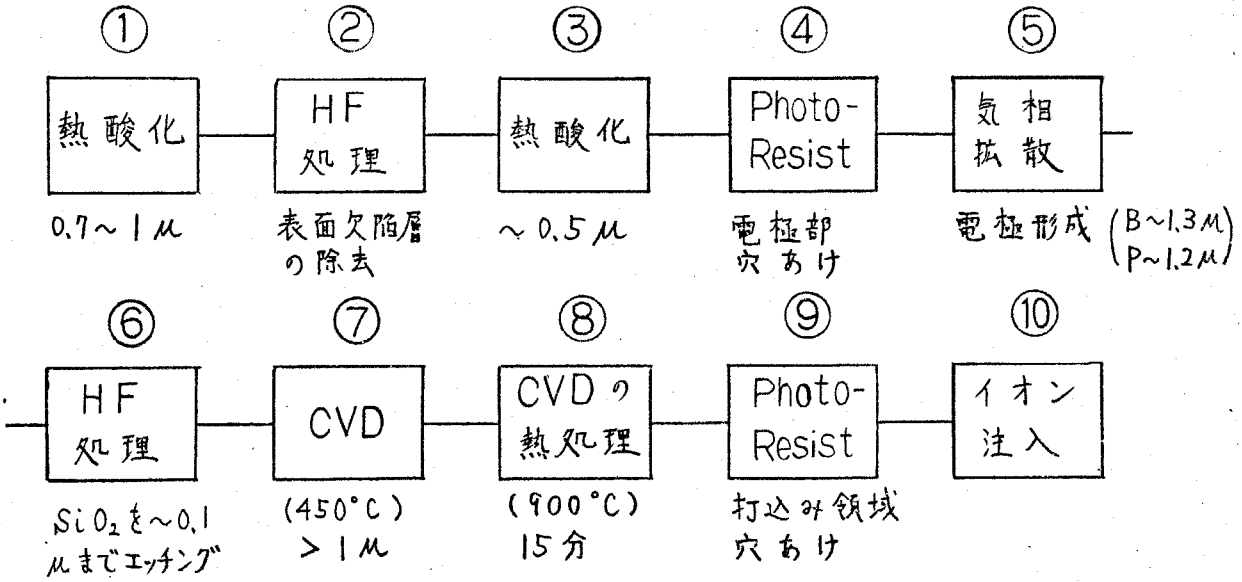
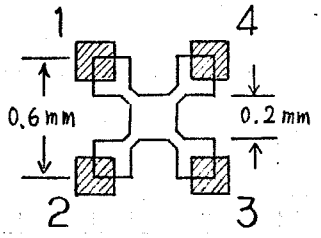


図 8-10 ホールパターンの製作法



□ 打込み領域
▨ 電極

図 8-11
ホール・パターンの形状

の磁場印加前後の変化 $\Delta V_{24,13}$ を測定して、次式より求められる。

$$R_s = \frac{\Delta V_{24,13}}{B\ I} \qquad (8.2)$$

式(8.1), (8.2)より, 表面から見込んだキャリア数 n_s, および易動度 μ_s は次式で与えられる。

$$n_s = \frac{3\pi}{8} \cdot \frac{1}{q R_s} \qquad (8.3)$$

$$\mu_s = \frac{1}{q\, n_s\, \rho_s} \qquad (8.4)$$

ここで, キャリアの散乱機構は音響フォノン散乱と仮定して、式(8.3)の係数に $3\pi/8$ を用いた。

測定に用いた試料のイオン注入条件は、Alイオンの打込み量が $\sim 8 \times 10^{14} cm^{-2}$ である点を除いては、格子欠陥分布の測定に用いた試料と同一である。また、ホール係数および抵抗率の測定は磁束密度2KG，直流電流 1mA で行なった。

8.4.2 電気的性質のアニール特性

Alおよびイオンを打込んだ試料の，キャリア数および易動度のアニール特性を図 8-12 に示す。

同図より，Pイオン打込みの場合，キャリアは 600°C のアニールにより 80% 程度活性化されるが，800°C のアニールでは，逆にキャリア数が減じ，格子欠陥の測定と対応して，キャリア数にも逆アニール現象が生じることが分る。

このキャリア数の減少は僅かであるが，同図の測定は，同一試料を順次アニール温度を上げながら測定したものであるから，打込み量のばらつきが原因と考えることはできない。また，キャリア数は，ホール係数より直接求まる値であるから，測定誤差の積み重ねによって生じたという可能性も少なく

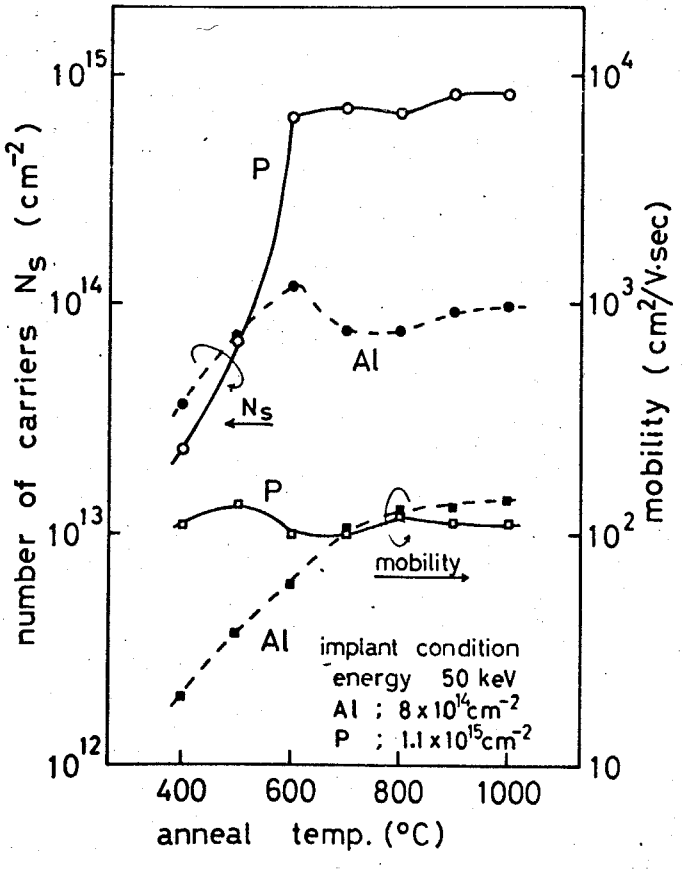


図 8-12
Al, P 打込み試料のキャリア数および易動度の等時アニール特性

物理現象として、キャリア数の減少が起っていると解釈することができる。

この温度領域におけるキャリア数の減少は、従来の報告の中にも見られるが、[221] Bイオンを打込んだ場合に見られる逆アニール現象[136],[165]と比較して顕著ではなく、この現象に特に注目した報告は無かった。しかし、このようにキャリア数の測定と、格子欠陥の測定を同時に行なった結果から考えると、Pイオンにおいても、$10^{15}cm^{-2}$ 程度打込んだ場合には、800°C付近において逆アニール現象が起きるということができる。

また、Pイオンの平均的な易動度は400°C以上のアニールにおいて顕著な変化を示さず、約 $110\ cm^2/V\,sec$ という値が得られた。

つぎに、Alイオンを $10^{15}cm^{-2}$ 打込んだ場合には、電気的に活性化されるキャリア数は、打込みイオンの約10%となること、および、700°C以上のアニール温度で、キャリア数が減少する逆アニール現象が起ることが報告されているが、[8] 本実験においても、このことが確認でき、格子欠陥分布の測定と対応する結果が得られた。

なお、Al打込み試料の易移度が、アニール温度とともに上昇する原因としては、Alイオンの異常拡散が起り、最大イオン濃度が低下するためと考えられる。

8.5 本章のまとめ

本章では、Heイオンの後方散乱法を用いて、イオン注入層に発生する格子欠陥のアニール特性について実験的な検討を行ない、電気的性質のアニール特性との対応から、以下のことを明らかにした。

(1) 章6において理論的に予想したとうり、質量のほぼ等しいイオンを、等量打込んだ場合に発生する格子欠陥量は、ほぼ等しい。

Al, Si, P イオンを打込んだ場合には、図6-12からの予想どうり、$1.1 \times 10^{15}\ cm^{-2}$ の打込み量によって、Si基板は非晶質となっている。

(2) 格子欠陥の回復特性は、アニール前に等量の欠陥が存在している場合にも、打込まれたイオンの種類によりそれぞれ異なり、Al, Si, Pを打込んだ試料については、格子欠陥が急速に回復する再結晶温度が存在するが、Ar打込み試料については、その様な温度が観測されない。

(3) 従来、欠陥層が非晶質となる場合には、逆アニール現象は起らないと考えられていたが、600°C～800°Cのアニール温度で、イオン注入層通過後の後方散乱数の増加が観測された。この原因として、イオン注入層の歪の増大が考えられ、格子欠陥に関する一種の逆アニール現象と考えることができる。

(4) Al, Pイオンを打込んだ試料について、格子欠陥分布のアニール特性と、電気的性質のアニール特性を比較した結果、両者のアニール

特性には密接な関係があり、格子欠陥の逆アニール現象が観測される温度でキャリア数も減少する。

以上の結論より、キャリアの逆アニール現象は、格子欠陥と、特定の不純物原子とが結びついた場合にのみ起る現象ではなく、格子欠陥の回復過程に存在する、かなり一般的な現象であることが推論できる。

第9章 結論

本研究は、イオン注入法を用いて半導体素子を設計、製作する場合に、明らかにしなくてはならない注入イオン分布および格子欠陥分布に関する理論的、実験的検討と、イオン注入層のアニール現象に関する実験的検討を目的として行なったものである。

特に、MOSFETのゲート閾値電圧制御を目的とした応用などに関連して、近年重要になってきたにもかかわらず、その理論的、実験的検討が報告されていない多層構造基板（Si上にSiO_2層などが付いた基板）中のイオン分布を、理論的、実験的に求めることを、主たる目的として研究を行なった。以下に本研究で得られた主な成果を示す。

(1) 単一層からなる基板中のイオン分布の分散に関する実験値が理論値よりも大きいという不一致について、理論値の精度に関する検討を行ない、従来、行なわれていた1階微分方程式を用いた近似解析法は、イオン分布の分散を正しく与えないこと、および、工学的に十分正確な分散を求めるためには、2階微分方程式を用いれば十分であり、3階微分方程式は用いる必要のないことを明らかにした。

(2) 単一層からなる基板中のイオンの射影飛程分布の、ガウス分布からのずれに関して検討を行ない、射影飛程の3次モーメントを考慮すると、最大イオン濃度を示す位置が、10%程度表面側に移動し、実験結果を良く説明できる場合のあることを明らかにした。

(3) 多層構造基板中のイオンの飛程分布を求めるために、基板中のイオンのエネルギー分布に基づいて、

イオンの飛程分布を求める解析法を提案した。この解析法を、従来の理論を用いて、飛程分布を求めることができる単一層からなる基板に適用し，従来の理論から求まる結果と比較して、解析法の妥当性を示した。

(4) 多層構造基板中のイオンの飛程分布を、各層の境界で、イオンのエネルギー分布が連続であるという条件を用いて求め、層の境界で、イオン濃度分布に段ができること、および，第2層基板中のイオンのエネルギー損失の割合が大きい場合には，第2層の表面濃度が，第1層の終端濃度よりも高くなり，逆に，第2層基板中のエネルギー損失の割合が小さい場合には、第2層の表面濃度が低くなることを明らかにした。

(5) 多層構造基板中のイオン分布に関する上記の結論が、打込みイオンの種類には、あまり依存しないこと，および，SiとSiO_2のように，単一層基板として用いた場合のイオン分布の形状がほぼ相似的である物質を組合わせた多層構造基板中のイオン分布は、従来の単一層基板に対する理論結果を組合わせることにより，近似的に表現できることを、物理的解釈に基づいて示した。

この結論を用いて，MOSFETのゲート閾値電圧を制御するためにイオン注入を行なう場合の，最適打込みエネルギーおよび，最適打込み量を求めるチャートを製作した。

(6) イオン注入により，基板中に発生する格子欠陥の空間分布を、入射イオンのエネルギー分布に基づいて求め、注入イオンにより直接作られる格子欠陥数は、全体の5～10%であり、大部分は、格子点を外れた基板原子により2次的に作られる欠陥であることを示した。

この解析法を適用して，重いイオンによりSi中に作られる格子欠陥分布を求め，最大欠陥密度を示す位置が，イオン濃度が最大となる位置よりも約1/3だけ表面側にあることなどの，結論を導いた。また，これらの結論が実験結果とも，かなり定量的に一致することを示した。

同様な方法により，2層構造基板中の格子欠陥分布を求め，Si基板にイオン注入を行なう場合には，直接注入を行なって，注入後に表面をエッチングするよりは，SiO_2層を通してイオン注入を行ない，注入後にSiO_2層を除去するほうが，同じ注入量に対して，格子欠陥量が約10%少ないことを明らかにした。

(7) イオン注入の際に，基板が非晶質となる限界の注入量に関する理論的検討を行ない，Siよりも軽いイオンを打込んだ場合には，イオンが軽くなるにしたがって限界注入量は急速に大きくなるが，Siよりも重いイオンを打込んだ場合には，イオンが重くなっても，限界注入量はそれほど急速に小さくならないことを明らかにした。また，この結論が，実験結果と定性的に良く一致すること，および，定量的な不一致の原因は，格子欠陥の室温アニール効果と考えられることを示した。

(8) Heイオンの後方散乱法を用いて，2層構造基板に注入されたイオンの空間分布を測定し，測定系の分解能を考慮した議論より，実験的に求まる2層構造基板中のイオン分布は，理論的予想を裏付けるものであることを明らかにした。また，測定系の分解能の影響を小さくし，より直接的にイオン分布を測定することが可能と考えられる実験条件および，試料の選定に関する考察を行なった。

(9) Heイオンの後方散乱法を用いて、イオン注入の際に発生する格子欠陥のアニール特性について検討を行ない、アニール温度を上昇させると格子欠陥量が増加するという逆アニール現象が、従来報告されていなかつた高温において起ることを示し、この現象が、注入イオンの種類を変えても生ずること、および、格子欠陥の逆アニール現象の起る温度で、活性化されたキャリア数も同時に減少することを明らかにした。

本研究の結果、単一層からなる基板中および多層構造基板中の注入イオン分布と、格子欠陥分布とが明らかとなつた。とくに、従来、全く検討が行なわれていなかつた多層構造基板中のイオン分布を明らかにして、MOSFETのゲート閾値電圧を制御するための最適打込み条件を求めたことは、半導体工学上、意義のあることと考えられる。

現在のところ、素子製作を目的として、多層構造基板にイオン注入を行なっているのは、MOSFETの例など限られた場合だけであるが、表面層を通して、半導体基板にイオン注入を行なうと、

(1) 結論(6)で述べたSiO_2－Si基板の場合のように、半導体中に発生する格子欠陥量を少なくできる可能性があること、

(2) 半導体基板の表面濃度が高くなり、オーミックコンタクトを取りやすいこと、

(3) イオン注入の際の基板表面の汚れが問題とならないこと、

(4) 打込み後のアニール処理の際に、外部不純物の混入や、基板構成元素の蒸発を防ぐことができることなどの利点が考えられる。

事実、Siビディコンの製作の場合には、このような目的のために、SiO_2層を通したイオン注入を行ない、良好な結果を得ている。このような目的で行なう2層構造基板へのイオン注入は、Siビディコンに限らず、一般の素子の製作の場合にも同様に望ましい条件であるから、多層構造基板中のイオン

分布，格子欠陥分布に関する，より詳細な検討と相まって，多層構造基板へのイオン注入は，今後ますます応用が広がってゆくと考えられる。

最後に，今後に残された問題点についてまとめると以下のようになる。

(1) 多層構造基板中のイオン分布に関しては，SiO_2-GaAs基板のように，それぞれの層を単一層基板としてイオン注入を行なった場合に，飛程分布の平均値と標準偏差との比が一致しない物質を組合わせた多層構造基板については，近似解析法を求めることができなかった。したがって，これらの基板については，イオンのエネルギー分布を表面から順次計算する解析法が必要となるが，この解析法によって求まる分布は，イオンの進む方向に沿った飛程分布であるため，イオンがほぼ直進する場合，すなわち，重いイオンを打込んだ場合にしか適用することができず，軽いイオンをこのような基板に打込んだ場合に，どのような空間分布になるかという問題が未解決のまま残されている。

(2) 重いイオンの打込みによって作られる格子欠陥の空間分布に関しては，原子核間の相互作用ポテンシャルとして，Thomas-Fermiポテンシャルを仮定した場合の解析が残されている。Thomas-Fermiポテンシャルを用いた場合には，基板原子に，臨界変位エネルギー以上のエネルギーを与える衝突断面積が変化し，章6で求めた格子欠陥密度は，定量的には変化することが予想される。ただし，現在のところ，基板原子の変位エネルギーが十分明らかではないので，実験結果との定量的な比較の精度を上げるためには，基板原子の変位エネルギーについても，精度良く求める必要がある。

(3) 多層構造基板中のイオン分布を，実験的に測定した試料は，理論的に予測される境界面におけるイオン濃度分布の段が小さく，また，

イオン分布の広がりが，測定系の分解能に比べて十分大きくなかったために，境界面付近のイオン濃度分布の詳細に関しては検討することができなかった。したがって，理論的に最も顕著な段が付くと予想される $Al_2O_3-SiO_2$ 基板などにイオン注入を行なった試料を準備して，測定系の分解能の影響を減らした測定を行ない，境界面付近のイオン濃度分布を詳細に検討することが，今後に残された大きな問題である。

謝辞

本論文を終るに当り、6年間にわたって、学問的には厳しく、人間的には暖かく御指導下さいました指導教官の古川静二郎助教授に心から感謝致します。本当にありがとうございました。

また、日頃の討論を通じ、いろいろ御指導下さいました西巻正郎教授、関口利男教授、末武国弘教授、川村光男教授、武者利光教授、末松安晴助教授、内藤喜之助教授をはじめとする本学マイクロ波グループの皆様に深く感謝致します。

さらに、試料の製作に関して快く便宜を計って下さいました酒井善雄教授をはじめとする酒井研究室の皆様に深く感謝致します。

バンデグラフ加速器を用いた実験では、理学部武谷沢助教授、原子炉工学研究所新井栄一助教授をはじめとするバンデグラフ加速器関係諸氏に大変お世話になりました。ここに、厚くお礼申し上げます。

また、試料製作に関して、イオン注入装置など、多大の便宜を計って下さいました日立中央研究所の徳山巍主管研究員をはじめとする第8部の皆様に厚くお礼申し上げます。

バンデグラフ加速器を用いた実験は、文部省受託研究員として派遣されていた現日立中央研究所員夏秋信義氏、博士課程1年松村英樹君と共同で行なわれたものです。夏秋氏は、この関係の実験に関して未経験な著者を、色々と御指導下さいました。松村君は、実験の進め方に関して、異なった立場から色々と助言を与えてくれました。ここに心から感謝致します。

なお、本研究の一部は、卒業学生宗像健志君、遠藤守君、小林右治君とともに行なったものであり、ここに記して深く感謝致します。

また、日頃、快く討論に応じて下さいました荻田陽一郎助手、本杉常治君、井上修君、浅井英一君をはじめとする古川研究室の皆様のご協力を忘れることはできません。ここに深く感謝致します。

参考文献

(1) Y.Ohmura, T.Abe, S.Mimura, M.Konaka, M.Kanazawa, H.Ohtsubo, and K.Fujinuma : "Enhanced Diffusion of Substrate Impurities into Epitaxial Layers in Si by Proton Irradiation", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971, pp.335-339 (Springer-Verlag, Berlin)

(2) J.A.Borders and W.Beezhold : "Infrared Studies of SiC, Si_3N_4 and SiO_2 Formation in Ion-Implantated Silicon", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971, pp.241-247 (Springer-Verlag, Berlin)

(3) 菅野卓雄, 森芳文:"GaAs処理へのガスプラズマの応用(1)", 電子通信学会半導体研究会資料, SSD 71-60 (1972年1月)

(4) 難波進:"荷電ビーム応用國際会議に出席して", 応用物理, 41, 10, pp. 1158-1159 (1972年10月)

(5) 長井一敏, 山口直史, 安田宏, 永井収, 平山利一:"$LiNbO_3$のイオンエッチ", 第19回応物関係連合講演会, 2a-B-7, 2a-B-8, 2a-B-9, (1972年4月)

(6) J.F.Gibbons, E.O.Hechtl, and T.Tsurushima : "Ion-Bombardment-Enhanced Etching of Silicon", Appl. Phys. Letters, 15, p.117 (1969)

(7) G.Fladda, K.Björkqvist, L.Eriksson, and D.Sigurd : "The Lattice Location of Boron Ions Implanted into Silicon", Appl. Phys. Letters, 16, 8, pp.313-315 (15 April, 1970)

(8) R.Baron, G.A.Shifrin, and O.J.Marsh : "Electrical Behavior of Group III and V Implanted Dopants in Silicon", J. Appl. Phys., 40, 9, pp.3702-3719 (Aug., 1969)

(9) N.G.E.Johansson and J.W.Mayer : "Technique Used in Hall Effect Analysis of Ion Implanted Si and Ge", Solid State Electron. 13, 3, pp.317-335 (March, 1970)

(10) J.W.Mayer, L.Eriksson, and J.A.Davies : "Ion Implantation in Semiconductors" (Academic Press, New York and London, 1970)

(11) B.L.Crowder, and J.M.Fairfield : "High Dose Implantations of P, As, Sb in Silicon ; A Comparison of Room Temperature Implantations Followed by a 550°C Anneal and Implantations Conducted at 600°C", J. Electrochem. Soc. ; Solid State Science, 117, 3, pp.363-367 (March, 1970)

(12) D.E.Davies : "Post Annealing Conductance Behavior of Implanted Layers in Silicon", Appl. Phys. Letters, 14, 7, pp.227-229 (1 April, 1969)

(13) 古川静二郎、井上修、石原宏："イオン注入時の表面温度に関する考察" 第33回応物講演会、1a-C-1、(1972年10月)

(14) N.G.Blamires : "The Influence of Ion Beam Current Densities on the Electrical Properties of Boron Implanted Silicon", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971, pp.119-123 (Springer-Verlag, Berlin)

(15) J.A.Davies, J.Denhartog, L.Eriksson, and J.W.Mayer : "Ion Implantation of Silicon, I . Atom Location and Lattice Disorder by Means of 1.0-MeV Helium Ion Scattering", Can. J. Phys. 45, pp.4053-4071 (1967)

(16) T.Tsuchimoto, and T.Tokuyama : "Enhanced Diffusion of Boron and Phosphorus in Silicon During Hot Sabstrate Ion Implantation", Proc. 1st Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Thousand Oaks, 1970, pp.121-129 (Gordon and Breach, N.Y.)

(17) K. Gamo, M. Iwaki, K. Masuda, S. Namba, S. Ishihara, and I. Kimura : "Enhanced Diffusion and Electrical Properties of Ion Implanted Silicon", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971, pp.459-465 (Springer-Verlag, Berlin)

(18) S.T. Picraux, J.E. Westmoreland, J.W. Mayer, R.R. Hart, and O.J. Marsh : "Temperature Dependence of Lattice Disorder Created in Si by 40keV Sb Ions", Appl. Phys. Letters, 14, 1, pp.7-9 (1 Jan., 1969)

(19) J.E. Westmoreland, J.W. Mayer, F.H. Eisen. and B. Welch : "Production and Annealing of Lattice Disorder in Silicon by 200keV Boron Ions", Appl. Phys. Letters, 15, 9, pp. 308-310 (1 Nov., 1969)

(20) N. Yoshihiro, T. Ikeda, M. Tamura, and T. Tokuyama : "Reverse Annealing of Boron-and Phosphorus-implanted Silicon" Proc. 3rd Conf. Solid State Devices, Tokyo, 1971, Suppl. J. Japan Soc. Appl. Phys. 40, pp.225-230 (1972)

(21) R.M. Allen : "Summation of Gaussians for Ion-Implantation Profile Control" Electron. Letters, 5, 6, pp.111-112 (20 March, 1969)

(22) 池田隆英, :"ほう素, りんイオン打込みによるシリコンnpnトランジスタ" 第1回理研シンポジウム"半導体へのイオン注入" pp. 121～135 (1970年2月)

(23) J.L. Assémat : "Application of Ion Implantation to N-P-N-Transistors" Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971 , pp351-356 (Springer- Verlag, Berlin)

4) R.A. Moline and G.F. Foxhall : "Ion-Implanted Hyperabrupt Junction Voltage Variable Capacitors", IEEE Trans. Electron Devices, ED-19, 2, pp.267-273 (Feb. 1972)

5) T.E. Seidel, R.E. Davis, and D.E. Iglesias : " Double-Drift-Region Ion-Implanted Millimeter-Wave IMPATT Diodes" Proc. IEEE, 59, 8, pp.1222-1228 (Aug., 1971)

6) 近藤元基, 阿部浩文, 長島功夫, 関戸健嗣:"多段イオン注入法によるダブルドリフト領域型インパットダイオード." 電気学会, 電子装置研究会資料 EDD-72-55 (1972年10月)

7) 高木俊宜:"イオン源" 第3回理研シンポジウム"半導体へのイオン注入" PP. 107～134 (1972年2月)

8) 槌本尚:"イオン注入装置について" 第3回理研シンポジウム "半導体へのイオン注入" PP. 135～141 (1972年2月)

9) 田村昌三, 徳山巍,"イオン打込み量の均一性に関する検討", 第19回応物関係連合講演会 2p-B-6 (1972年 4月)

0) 徳山巍, 池田隆英:"集積回路特集, 3·3 イオン打込み" 信学誌, 55, 4, PP. 481～485 (1972年 4月)

1) R.W. Bower, H.G. Dill, K.G. Aubuchon, and S.T. Thompson "MOS Field Effect Transistors Formed by Gate Masked Ion Implantation", IEEE Trans. Electron Devices, ED-15, 10, pp.757-761 (Oct. 1968)

2) H.G. Dill, R.W. Bower, and T.N. Toombs : "Ion-Implanted MOS Technology", Proc. 1st Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Thousand Oaks, 1970, pp.349-361 (Gordon and Breach, N.Y.)

(33) S. Furukawa, H. Matsumura, and H. Ishiwara : "Theoretical Considerations on Lateral Spread of Implanted Ions", Japan. J. Appl. Phys. 11, 2, pp.134-142 (Feb. 1972)

(34) T. Tanaka : "Shift of the Gate Threshold Voltage of MOS Transistors due to the Introduction of Shallow Impurities", Japan. J. Appl. Phys. 10, 1, pp.84-91

(35) K.G. Aubuchon, Intern. Conf. Properties and Use of M.I.S. Structures, Grenoble, 17-20 (June, 1969)

(36) M.R. MacPherson : "The Adjustment of MOS Transistor Threshold Voltage by Ion Implantation", Appl. Phys. Letters, 18, 11, pp.502-504 (1 June, 1971)

(37) 藪迫光紀, 西松 茂 :"MOS 構造へのイオン注入" 第2回 理研シンポジウム "半導体へのイオン注入" P.11~21 (1971年2月)

(38) 徳山 巍 :" MOSFET への応用" 第3回 理研シンポジウム "半導体へのイオン注入" 155~168 (1972年2月)

(39) R.S. Ying, R.G. Mankarious, D.L. English, R.W. Bower, and L.E. Coerver : "Characterization of Ion-Implanted IMPATT Oscillators", IEEE J. Solid-State Circuits, SC-3, pp.225-231 (Sept. 1968)

(40) T. Misawa, R.A. Moline, and A.R. Tretola : "10GHz Si Schottky-Barrier IMPATT Diode with Hyperabrupt Impurity Distribution Produced by Ion Implantation", Solid-State Electron., 15, pp.189-193 (1972)

(41) T.E. Seidel, and D.L. Scharfetter : "High Power Millimeter Wave IMPATT Oscillators with Both Hole and Electron Drift Spaces Made by Ion Implantation", Proc. IEEE, 58, 7, pp.1135-1136 (July, 1970)

(42) D.L. Scharfetter, W.J. Evans, and R.L. Johnston : "Double-Drift-Region(p^+pnn^+) Avalanche Diode Oscillators", Proc. IEEE, 58, 7, pp.1131-1133 (July, 1970)

(43) M. Morizot, A. Dubee, and A. Cornette : "Microwave Transistors Fabricated by Ion-Implantation Selection of Doping Impurities and Prototype Realization", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971, pp.345-350 (Springer-Verlag, Berlin)

(44) K. Fujinuma, T. Sakamoto, T. Abe, K. Sato, and Y. Ohmura : "Silicon Microwave Transistors Made by New Techniques", Proc. 1st Conf. Solid State Devices, Tokyo, 1969, Suppl. J. Japan Soc. Appl. Phys. 39, pp.71-77 (1970)

(45) K.A. Pickar, J.V. Dalton, H.D. Seidel, and J.R. Mathews : "Electrical Properties of Silicon Diode Array Camera Targets Made by Boron Ion Implantation", Appl. Phys. Letters, 19, 2, pp.43-44 (15 July, 1971)

(46) A.U. MacRae : "Recent Advances in Ion Implanted Junction-Device Technology", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971, pp.329-334 (Springer-Verlag, Berlin)

(47) K.A. Picker, H.D. Seidel, J.R. Mathews, and J.V. Dalton : "Ion Implantation of Boron and Phosphorus in the Fabrication of Silicon Diode Array Camera Targets",. Intern. Electron Devices Meeting, 17-4 (Oct. 1971)

(48) 西田克彦, 中島眞人, 松井純爾 : "イオン打込み法によるアバランシェ・フォトダイオード (APD)" 第32回応物講演会. 2P-F-5 (1971年 11月)

(49) A.U. MacRae : "Device Fabrication by Ion Implantation", Proc. 1st Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Thousand Oaks, 1970, pp.363-367 (Gordon and Breach, N.Y.)

(50) A. Bobenrieth, P.N. Tung, and C. Arnodo : "Junction Field Effect Transistors Fabricated by Ion Implantation", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971, pp.340-344 (Springer-Verlag, Berlin)

(51) W.C. Gibson, R.A. Moline, and L.D. Heck : "An Ion Implanted Shottky-Barrier Junction Field Effect Transistor", Intern. Electron Devices Meeting, 21-5 (Oct.,1971)

(52) 篠田大三郎, 岡林秀和,:"イオン注入のショットキ障壁ゲートFETへの応用" 理研シンポジウム"半導体へのイオン注入" pp.143～153 (1972年2月)

(53) L.G. McAfee et al. "Ion Implantation for Junction FET Compatible IC", Intern. Electron Devices Meeting 22-4 (Oct. 1970)

(54) M.P. Lepselter, A.U. MacRae, and R.W.MacDonald : "SB-IGFET,II ; An Ion Implanted IGFET Using Schottky Barrier", Proc. IEEE, 57, 5, pp.812-813 (May, 1969)

(55) J.D. Macdougall, K.E. Manchester, and P.E. Roughan : "High Value Implanted Resistors for Microcircuits", Proc. IEEE, 57, 9, pp.1538-1542 (Sept,1969)

(56) K.H. Nicholas and R.A. Ford : "New Techniques for Improving High Value Ion Implanted Resistors", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971,pp.357-361 (Springer-Verlag, Berlin)

(57) T.E.Seidel and W.C.Gibson : "Buried Layer Ion Implanted Resistors", Intern. Electron Devices Meeting, 17-3 (Oct.,1971)

(58) J.B. Schroeder and H.D. Dieselman : "Implantation of Zinc into Gallium Arsenide", Proc.IEEE, 55, 1, pp.125-126 (Jan. 1967)

(59) J.W. Mayer, O.J. Marsh, R. Mankarious, and R. Bower : " Zn and Te Implantations into GaAs", J. Appl. Phys., 38, 2, pp.1975-1976(15 March, 1967)

(60) T. Itoh and Y. Kushiro : " The Effects of Arsenic Ion Implantation in GaAs ", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors,Garmish-Partenkirchen 1971, pp.151-156 (Springer-Verlag, Berlin)

(61) K.E. Drangeid, R. Sommerhalder, and W. Walter : " High-Speed Gallium Arsenide Schottky-Barrier Field-Effect Transistors ", Electronics Letters, 6, pp.228-229 (16 April, 1970)

(62) W.W. Anderson and J.T. Mitchell : "Phosphorous-Ion-Implanted CdS ", Appl. Phys. Letters, 12, 10, pp.334-336 (15 May,1968)

(63) F. Chernow, G. Eldridge, G. Ruse, and L. Wåhlin : " High Conductivity p-type CdS ", Appl.Phys.Letters, 12, 10,pp.339-341 (15 May,1968)

(64) S.L. Hou and J.A. Marley,Jr. : " Photoelectronic Properties of Ion-Implanted CdS ", Appl.Phys.Letters, 16, 11, pp.467-469 (1 June,1970)

(65) B. Tell, W.M. GIbson and J.W. Rogers : "Ion Implantation of Sodium, Lithium, and Neon in Cadmium Sulfide", Appl. Phys. Letters, 17, 6, pp.315-318 (15 Oct.,1970)

(66) Y. Shiraki, T. Shimada, and K.F. Komatsubara : " Ion Implantation of Nitrogen into n-type Cadmium Sulfide', Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen,1971, pp.235-240 (Springer-Verlag, Berlin)

(67) B. Tell and W.M. Gibson : "Properties of Ion-Implanted Bi in CdS ", J. Appl. Phys. 40, 13, pp.5320-5323 (Dec., 1969)

(68) H.L. Dunlap and O.J.Marsh : "Diode in Silicon Carbide by Ion Implantation ", Appl. Phys. Letters, 15, 10, pp.311-313 (15 Nov.,1969)

(69) O.J. Marsh and H.L. Dunlap : " Ion Implanted Junctions and Conducting Layers in SiC ", Proc. 1st Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Thousand Oaks, 1970 pp.285-296 (Gordon and Breach, N.Y.)

(70) R.R. Hart, H.L.Dunlup, and O.J. Marsh : " Backscattering Analysis and Electrical Behavior of SiC Implanted with 40 keV Indium ", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmish-Partenkirchen, 1971, pp. 134-140 (Springer-Verlag,Berlin)

(71) S.L. Hou, K. Beck, and J.A. Marley,Jr : " Type Conversion and p-n Junction Formation in Ion-Implanted ZnTe ", Appl. phys. Letters, 14, 5, pp.151-154 (1 March, 1969)

(72) J. Marine and H. Rodot : " P-N Junction Formation in Ion Implanted ZnTe ", Appl. Phys. Letters, 17, 8, pp.352-354 (15 Oct., 1970)

(73) J.L. Merz, L.C. Feldman, and E.A. Sadowski : "Ion Implantation of Bismuth into Gap : I.Photoluminescence", Proc. 1st Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Thousand Oaks, 1970, pp.269-276 (Gordon and Breach, N.Y.)

(74) L.C. Feldman, W.M. Augustyniak, and J.L. Merz : " Implantation of Bi into GaP : II.Channeling Studies", Proc. 1st Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Thousand Oaks, 1970, pp.277-284 (Gordon and Breach, N.Y.)

(75) J.E. Davey, T. Pankey, P.R. Malmberg, and W.H. Lucke: "Ion-Implantation Induced Optical Absorption Edge Shifts in GaP", Appl. Phys. Letters, 17, 8, pp.323-325 (15 Oct. 1970)

(76) J.L. Merz, D.W. Mingay, W.M. Augustyniak, and L.C. Feldman : "Implantation of Bi into GaP : III Hot-Implant Behaviour ", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971, pp. 182-192 (Springer-Verlag, Berlin)

(77) P.J. McNally, : "Ion Implantation in InAs and InSb", Proc. 1st Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Thousand Oaks, 1970, pp. 405-410 (Gordon and Breach, N.Y.)

(78) G. Langguth, E. Lang, and O. Meyer : "Lattice Disorder and Outdiffusion in Ion Implanted InSb and CdTe", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971, 228-234 (Springer-Verlag, Berlin)

(79) L.A. Davidson, S. Chou, J.F. Gibbons, and W.S. Johnson : "Analysis of Ion Implanted Diamond", Proc. 1st Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Thousand Oaks, 1970, pp.333-342, (Gordon and Breach, N.Y.)

(80) H. Herzer and S. Kalbitzer, "Electrical Properties of Ion Implanted Germanium", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971, pp. 307-314 (Springer-Verlag, Berlin)

(81) H. Aritome, T. Ikegami, T. Nishimura, K. Masuda, and S. Namba : "Formation of Optical Waveguide by Ion-Implantation into Fused Quartz",Digest of Tech. Papers of 4th Conf. Solid State Devices, Tokyo, 1972. No. 4-5 pp. 47-48

(82) W.L. Brown: "New Ion Implantation Areas" Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971, pp. 430-438,(Springer-Verlag, Berlin)

(83) G.H. Schwuttke, K. Brack, E.F. Gorey, A. Kahan, and L.F. Lowe: "Resistivity and Annealing Properties of Implanted Si;H^+", Proc. 1st Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Thousand Oaks, 1970, pp. 139-142.(Gordon and Breach, N.Y.)

(84) A.G. Foyt, W.T. Lindley, C.M. Wolfe, and J.P. Donnelly: "Isolation of Junction Devices in GaAs Using Proton Bombardment", Solid-State Electron. 12, pp. 209-214 (1969)

(85) W.D. Cussins; Proc. Phys. Soc., B 68, P. 213, (1955)

(86) A.G. Foyt, T.C. Harman, and J.P. Donnelly : "Type Conversion and n-p Junction Formation in $Hg_{1-x}Cd_xTe$ Produced by Proton Bombardment", Appl. Phys. Letters, 18, 8, pp. 321-323 (15 April, 1971)

(87) A.G. Foyt, W.T. Lindley, and J.P. Donnelly : "n-p Junction Photodetectors in InSb Fabricated by Proton Bombardment", Appl. Phys. Letters, 16, 9, pp.335-337 (1 May, 1970)

(88) J.P. Donnelly, A.R. Calawa, T.C. Harman, A.G. Foyt, and W.T. Lindley : "$Pb_{1-x}Sn_xTe$ Photovoltaic Diodes and Diode Lasers Produced by Proton Bombardment", Solid-State Electron. 15, 4, pp.403-407 (April,1972)

(89) R.S. Ohl; Bell System Tech. J., 31, 104 (1952)

(90) 榊原 裕，岡村静致，岡部隆博：“イオン衝撃を利用したマイクロ波帯ミサキ・ダイオード” 電子通信学会 電子装置 研究会 ED 72-39 (1972年 10月)

(91) L.A. D'Asaro, J.C. Dyment, and J.C. North :"Proton Bombardment Formation of Stripe-Geometry Heterstructure Lasers for 300°K CW Operation", Intern. Electron Devices Meeting, 1971, 19-2 (Oct. 1971)

(92) W.T. Lindley, R.J. Phelan Jr., C.M. Wolfe, and A.G. Foyt : "GaAs Schottky Barrier Avalanche Photodiodes", Appl. Phys. Letters, 14, 6, pp. 197-199 (15 March, 1969)

(93) B.R. Pruniaux, J.C. North, and G.L. Miller : "Compensation of N-Type GaAs by Proton Bombardment", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971, pp. 212-221 (Springer-Verlag, Berlin)

(94) T. Abe, Y. Ohmura, M. Konaka, H. Ohtsubo, M. Kanazawa, and K. Koike : "Radiation Enhanced Diffusion and Its Application to Device Fabrication", Proc. 2nd Conf. Solid State Devices, Tokyo, 1970,Suppl. J. Japan Soc. Appl. Phys. 40, pp. 16-23. (1971)

(95) S. Yamamoto, T. Sakamoto, Y. Zohta, K. Mimura, Y. Ohmura, M. Kanazawa, K. Koike, M. Konada, and T. Abe : " Application of Radiation Enhanced Diffusion to Microwave Transistor Fabrication ", Intern. Eelctron Devices Meeting, 20-2 (Oct., 1971)

(96) G.R. Piercy, F.Brown, J.A. Davies, and M. McCargo : "Experimental Evidence for the Increase of Heavy Ion Ranges by Channeling in Crystalline Structure", Phys. Rev. Letters 10,pp.399-400 (1 May, 1963)

(97) J. Lindhard, M. Scharff and H.E. Schiott : "Range Concepts and Heavy Ion Ranges", K. Danske Vidensk. Selsk. mat.-fys. Medd., 33, 14, p.1 (1963)

(98) 槌本 尚, 徳山 巍, 田内省二：“イオンビーム打込みによるpn接合の形成” 真空, 11; 2, PP. 54～60 (昭和43年)

(99) N. Bohr : K. Danske Vindensk. Selsk. mat.-fys. Medd., 18, 8, p.1 (1948)

(100) J. Lindhard and M. Scharff : "Energy Dissipation by Ions in the keV Region", Phys. Rev. 124, 1, pp. 128-130 (Oct. 1, 1961)

(101) J.A. Davies, F. Brown, and M. McCargo : Can. J. Phys. 41, 829 (1963)

(102) B. Bomeij, F. Brown, J.A. Davies, and M. McCargo : " Ranges of Heavy Ions in Amorphous Oxides", Can. J. Phys. 42, pp. 1624-1634 (Aug. 1964)

(103) U. Fano : "Penetration of Proton, Alpha Particles, and Mesons", Ann. Rev. Nucl. Sci., 13, pp. 1-66, (1963)

(104) M. Walske ; Phys. Rev. 88, p. 1283 (1952)

(105) M. Walske ; Phys. Rev. 101, p. 940 (1956)

(106) D.A.Thompson and W.D. Mackitosh : "Stopping Cross Sections for 0.3- to 1.7-MeV Helium Ions in Silicon and Silicon Dioxide", J. Appl. Phys. 42, 10, pp.3969-3976 (Sept.,1971)

(107) O.B. Firsov : "A Qualitative Interpretation of the Mean Electron Excitation Energy in Atomic Collisions", Soviet Phys. JETP, 36(9) 5, pp. 1076-1080 (Nov. 1959)

(108) J. Lindhard and A. Winther : " Stopping Power of Electron Gas and Equipartition Rule", K. Danske Vidensk. Selsk. mat.-fys. Medd., 34, 4, pp. 1-22 (1964)

(109) J. Lindhard, V. Nielsen, and M. Scharff ; "Approximation Method in Classical Scattering by Screened Coulomb Fields", K. Danske Vidensk. Selsk. mat.-fys. Medd., 36, 10, pp. 1-32 (1968)

(110) R.S. Nelson : "The Observation of Atomic Collisions in Crystalline Solids", (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1968), pp. 3-16

(111) J.H. Ormrod and H.E. Duckworth : "Stopping Cross Sections in Carbon for Low-Energy Atoms with $Z \leq 12$", Can. J. Phys. 41, 9, pp. 1424-1442 (Sept. 1963)

(112) J.H.Ormrod, J.R. Macdonald, and H.E. Duckworth : "Some Low-Energy Atomic Stopping Cross Sections", Can. J. Phys. 43, 2, pp. 275-284 (Feb. 1965)

(113) B. Fastrup, P. Hvelplund, and C.A. Sautter : "Stopping Cross Section in Carbon of 0.1-1.0 MeV Atoms with $6 \leq Z_1 \leq 20$", K. Danske Vidensk. Selsk. mat.-fys. Medd., 35, 10, pp.1-28 (1966)

(114) L. Eriksson, J.A. Davies,and P. Jespersgaard : "Range Measurements in Oriented Tungsten Single Crystals (0.1-1.0 MeV). I.Electronic and Nuclear Stopping Powers", Phys. Rev. 161, 2, pp. 219-234 (10 Sept. 1967)

(115) P. Hvelplund and B. Fastrup : "Stopping Cross Section in Carbon of 0.2-1.5 MeV Atoms with $21 \leq Z_1 \leq 39$" Phys. Rev. 165, 2, pp. 408-414 (10 Jan. 1968)

(116) F.H. Eisen:"Channeling of Medium-Mass Ions through Silicon", Can. J. Phys. 46, pp. 561-572 (1968)

(117) L.D. Landau and E.M. Lifshitz : "Quntum Mechanics, Non-Relativistic Theory", 2nd ed. pp. 241-246 (Pergamon Press, Oxford, 1965)

(118) I.M. Cheshire, G. Dearnaley, and, J.M. Poate : "The Z_1-Dependence of Electronic Stopping", Phys. Letters, 27A, 5, pp. 304-305 (15 July, 1968)

(119) A.H. El-Hoshy and J.F. Gibbons : "Periodic Dependence of the Electronic Stopping Cross Section for Energetic Heavy Ions in Solids", Phys. Rev. 173, 2, pp. 454-460 (10 Sept. 1968)

(120) D.E. Harrison Jr. : "Interpretation of the Periodicity in Energy Loss of a Well-Channeled Ion with Respect to its Nuclear Charge", Appl. Phys. Letters, 13, p. 277 (1968)

(121) F.H. Eisen, B. Welch, J.E. Westmoreland, and J.W. Mayer, "Lattice Disorder Produced in Silicon by Boron Ion Implantation", Proc. Intern. Conf. Atomic Collision Phenomena in Solids, Sussex, 1969, pp.111-127

(122) T.E. Seidel : "Distribution of Boron Implanted Silicon", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971, p.47-57 (Springer-Verlag, Berlin)

(123) R.S. Nelson and M.W. Thompson ; Phil. Mag. 8,p.1677 (1963)

(124) M.T. Robinson and O.S. Oen : "The Channeling of Energetic Atoms in Crystal Lattices", Appl. Phys. Letters 2, 2, pp. 30-32 (15 Jan., 1963)

(125) M.T. Robinson and O.S. Oen : "Computer Studies of the Slowing Down of Energetic Atoms in Crystals", Phys. Rev. 132, 6, pp. 2385-2398 (15 Dec., 1963)

(126) J. Lindhard : "Influence of Crystal Lattice on Motion of Energetic Charged Particles", K. Danske Vidensk. Selsk. mat-fys. Medd., 34, 14, pp. 1-65 (1965)

(127) R.A. Moline and G.W. Reutlinger : "Phosphorous Channeled in Silicon ; Profiles and Electrical Activity", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971 pp. 58-69 (Springer-Verlag, Berlin)

(128) V.G.K. Reddi and J.D. Sansbury : "Channeling of Phosphorous Ions in Silicon", Appl. Phys. Letters, 20, 1, PP. 30-31 (1 Jan., 1972)

(129) J.F. Gibbons, A. EL-Hoshy, K.E. Manchester, and F.L. Vogel : "Implantation Profiles for 40-keV Phosphorus Ions in Silicon Single-Crystal Substrates", Appl. Phys. Letters, 8, 2, pp. 46-48 (15 Jan., 1966)

(130) Y.V. Martynenko : "Distribution in Penetration Depth of Channeled Particles", Soviet Phys. Solid State, 13, 9, pp. 2166-2171 (March, 1972)

(131) 池田隆英：私信

(132) S.T. Picraux, J.A. Davies, L. Eriksson, N.G.E. Johansson, and J.W. Mayer : "Channeling Study in Diamond-Type Lattices", Phys. Rev. 180, 3, pp. 873-882 (15 April, 1969)

(133) L. Eriksson, J.A. Davies, N.G.E. Johansson, and J.W. Mayer : "Implantation and Annealing Behavior of Group III and V Dopants in Silicon as Studied by the Channeling Technique", J. Appl. Phys., 40, 2, pp.842-854 (Feb., 1969)

(134) 塚田甲子男：" ブロッキング効果を利用した核反応時間の測定", 日本原子力学会誌, 14, 5, pp. 14～22 (1972年)

(135) K.Komaki, F. Fujimoto, H. Nakayama, M. Ishii, and K. Hisatake : "Measurement of the Reaction Time for the $^{27}Al(p,\alpha)^{24}Mg$ Reaction by the Use of the Blocking Effect", Phys. Letters, 38 B, 4, pp. 218-219 (21 Feb., 1972)

(136) M. Tamura, T. Ikeda, and T. Tokuyama : "Crystal Defects and Electrical Properties in Ion-Implanted Silicon", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors Garmisch-Partenkirchen, 1971, pp. 96-102 (Springer-Verlag, Berlin)

(137) J.C. North and W.M. Gibson : "Channeling Study of Boron-Implanted Silicon", Appl. Phys. Letters, 16, 3, pp.126-129 (1 Feb., 1970)

(138) J.C. North and W.M. Gibson : "Channeling Study of Boron Implanted Silicon ; Liquid Nitrogen Temperature Implantation", Proc. 1st Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Thousand Oaks, 1970, pp. 143-147 (Gordon and Breach, N.Y.)

(139) H. Müller, H. Ryssel, and I. Ruge : "A New Method for Boron Doping of Silicon by Implantation of BF_2-Melecules", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971, pp. 85-95, (Springer-Verlag, Berlin)

(140) L.O. Bauer : "Enhanced Annealing Effects of Bron Implanted Layers in Silicon by Post-Implantation of Silicon Ions", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971, pp.70-78 (Sprinber-Verlag, Berlin)

(141) 池田隆英:"イオン打込みによるSiへのlight doping" 第2回理研シンポジウム"半導体へのイオン注入,イオン注入した半導体の格子欠陥", pp.23~35 (1971年2月)

(142) 徳山巍:"イオン注入法によるシリコン素子製作技術" 昭和45年電四連大予稿 S.11-6 (1970年4月)

(143) S. Namba, K. Masuda, K.Gamo, A. Doi, S. Ishihara, and I. Kimura : "Enhanced Diffusion in Ion Implanted Silicon", Proc. 1st Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Thousand Oaks, 1970, pp. 231-236 Gordon and Breach, N.Y.)

(144) T. Itoh and I. Ohdomari : "Analysis of Radiation-Enhanced Deffusion of Aluminum in Silicon", J. Appl. Phys., 41, pp. 434-436 (1970)

(145) D.G. Nelson, J.F. Gibbons, and W.S. Johnson : "Radiation-Enhanced Diffusion of Bron in Silicon", Appl. Phys. Letters, 15, 8, pp. 246-248 (15 Oct., 1969)

(146) J.F. Gibbons: "Ion Implantation in Semiconductors Part I Range Distribution Theory and Experiments", Proc. IEEE, 56, 3, pp. 295-319 (March, 1968)

(147) W.S. Johnson and J.F. Gibbons : "Projected Range Statistics in Semiconductors", Stanford University Press, Stanford (1969)

(148) M.D. Matthews : "Electrical and Electron Microscope Observations on Antimony-Implanted Silicon", J. Materials Science 4, pp. 997-1002 (1969)

(149) K. Gamo, M. Iwaki, K. Masuda, S. Namba, S. Ishihara, and I. Kimura : "Concentration Profiles of Room Temperature Ion Implanted Indium in Silicon", Japan. J. Appl. Phys. 10, 4, pp. 523-525 (Apr. 1971)

(150) H.E. Schiott : "Range-Energy Relations for Low-Energy Ions", K. Danske Vindensk. Selsk. mat.-fys. Medd., 35, 9, pp.1-20 (1966)

(151) P. Sigmund and J.B. Sanders : "Spatial Distribution of Energy Deposited by Ionic Bombardment", Proc. Int. Conf. Application of Ion Beams to Semiconductors Technology, Grenoble, pp. 215-238 (Edition Ophrys, 1967)

(152) J.B. Sanders : "Range of Projectiles in Amorphous Materials", Can. J. Phys. 46, pp. 455-465 (1968)

(153) B.L. Crowder : "The Influence of the Amorhpous Phase on Ion Distributions and Annealing Behavior of Group III and V Ions Implanted into Silicon", J. Electrochem. Soc. 118, 6, pp. 943-952 (June, 1971)

(154) R.A. Moline : "Ion-Implanted Phosphorous in Silicon; Profiles Using C-V Analysis", J. Appl. Phys. 42, 9, pp. 3553-3558 (Aug. 1971)

(155) V.G.K. Reddi and J.D. Sansbury : "Profiles in Ion Implanted Phosphorous in Silicon; Channeling and Dechanneling", Intern. Electron Devices Meeting 17-2 (1971)

(156) E.M. Baroody : "Influence of Anisotropic Scattering on Stopping by Elastic Collisions", J. App., Phys. 36, 11, pp. 3565-3573 (Nov. 1965)

(157) S. Nishimatsu, N. Natsuaki, T. Warabisako, and T. Tokuyama : "Ion Implanted MOSFET", Proc. 2nd Conf.Solid State Devices, Tokyo, 1970, Suppl. J. Japan Soc. Appl. Phys. 40, pp. 29-35 (1971)

(158) R.B.パルマー："イオン注入による MOS LSI" 電子材料 10, 1, PP. 21～25 (1971年, 1月)

(159) A. VAN Wijngaarden and L. Hastings : "Radiation Damage in ZnO : Zn by Heavy Ions", Can. J. Phys. 45, pp.3803 -3814 (1967)

(160) T. Tsurushima and H. Tanoue : "Spatial Distribution of Energy Deposited by Energetic Heavy Ions in Semiconductors", J. Phys. Soc. Japan, 31 6, pp. 1695-1711 (Dec., 1971)

(161) D.K. Brice : "Ion Implantation Depth Distributions : Energy Deposition into Atomic Processes and Ion Locations", Appl. Phys. Letters, 16, 3, pp. 103-106 (1 Feb., 1970)

(162) I.V. Mitchell, M. Kamoshida, and J.W. Mayer : "Channeling-Effect Analysis of Thin Films on Silion ; Aluminum Oxide", J. Appl. Phys. 42, 11, pp. 4378-4389 (Oct., 1971)

(163) J. Gyulai, O. Meyer, and J.W. Mayer : "Analysis of Silicon Nitride Layers on Silicon by Backscattering and Channeling Effect Measurements", Appl. Phys. Letters, 16, 6, pp. 232-234 (15 March, 1970)

(164) 赤坂洋一，堀江和夫，河津 哲："Siにイオン注入したボロンの分布" 電気学会 電子装置研究会資料 EDD-72-51 (1972年10月)

(165) 松森徳衛，前川 洋，小林敏彦，和泉富雄："SiへのB$^+$およびP$^+$イオン打込み層の逆アニール特性" 電気学会 電子装置研究会資料 EDD-72-52 (1972年10月)

(166) S.M. Davidson : "Electrical Profiles of Ion Implanted Silicon and their Comparison with Defect Structures", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971, pp. 79-84 (Springer-Verlag, Berlin)

(167) K. Gamo, K. Masuda, S. Namba, S. Ishihara, and I. Kimura : "Enhanced Diffusion of High Temperature Ion-Implanted Antimony into Silicon", Appl. Phys. Letters, 17, 9, pp. 391-393 (1 Nov. 1970)

(168) 藤沼功一，坂本敏朗，小中雅水，大坪宏，大村八通，金沢守："REDのマイクロ波トランジスタへの応用" 第2回 理研シンポジウム "半導体へのイオン注入" P. 81 (1971年2月)

(169) J. Lindard, V. Nielsen, M. Scharff, and P.V. Thomsen : "Integral Equations Governing Radiation Effects", K. Danske. Vidensk. Selsk. mat.-fys. Medd., 33, 10, pp. 1-42 (1963)

(170) K.B. Winterbon, P. Sigmund, and J.B. Sanders : "Spatial Distribution of Energy Deposited by Atomic Particles in Elastic Collision", K. Danske Vidensk. Selsk. mat.-fys. Medd., 37, 14, pp. 1-73 (1970)

(171) M. Yosida : "Distribution of Interstitials and Vacancies Produced by an Incident Fast Neutron", J. Phys. Soc. Japan 16, 1, pp. 44-50 (Jan. 1961)

(172) P.V. Pavlov, D.I. Tetel'baum, E.I. Zorin, and V.I. Alekseev : "Distribution of Implanted Atoms and Radiation Effects in the Ion Bombardment of Silicon (Monte Carlo Calculation Method)", Soviet Phys. Solid State 8, 9, pp. 2141-2146 (March, 1967)

(173) J.F. Gibbons : "Lectures on Ion Implantation and Proton-Enhanced Diffusion", Tokyo; Japan. Soc. Appl. Phys. (Aug. 1971)

(174) J.F. Gibbons : "Ion Implantation in Semiconductors Part II ; Damage Production and Annealing", Proc. IEEE, 60, 9, pp. 1062-1096 (Sept., 1972)

(175) 斉藤晴男：“半導体の点欠陥の挙動” 第2回 理研シンポジウム，“半導体へのイオン注入，イオン注入した半導体の格子欠陥” pp. 241～248 (1971年 2月)

(176) R.L. Novak ; Bull. Am. Phys. Soc., 8, p. 235 (1963)

(177) H. Flicker, J.J. Loferski, and J. Scott-Monch ; Phys. Rev. 128, p. 2557 (1962)

(178) F.F. Morehead Jr. and B.L. Crowder : "A Model for the Formation of Amorphous Si by Ion Bombardment",Proc. 1st Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Thousand Oaks, 1970, pp. 25-30 (Gordon and Breach, N.Y.)

(179) P. Sigmund : "On the Number of Atoms Displaced by Implanted Ions or Energetic Recoil Atoms", Appl. Phys. Letters, 14, 3, pp. 114-117 (1 Feb. 1969)

(180) J.W. Mayer, L. Eriksson, S.T. Picraux, and J.A. Davies : "Ion Implantation of Silicon and Germanium at Room Temperature, Analysis by Means of 1.0-MeV Helium Ion Scattering", Can. J. Phys. 46, 6, pp. 663-673 (15 March, 1968)

(181) E. Bøgh, P. Høgild, and I. Stensgaard : "Spatial Distribution of Deffects in Ion Bombarded Silicon and Germanium", Proc. 1st Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Thousand Oaks, 1970, pp. 431-437 (Gordon and Breach, N.Y.)

(182) L.C. Feldman and J.W. Rodgers : "Depth Profiles of the Lattice Disoder Resulting from Ion Bombardment of Silicon Single Crystals", J. Appl. Phys. 41, 9, pp. 3776-3782 (Aug. 1970)

(183) 古川静二郎, 夏秋信義, 石原宏, 松村英樹："イオン注入により生じるSi単結晶中の欠陥分布の測定と解析法の検討", 物性研短期研究会「荷電粒子のチャンネリング"およびブロッキング"効果の基礎と応用」(1971年11月)

(184) A. Monfret and J. Bernard : "Chemical and Electrical Behaviour of Ion Implanted SiO_2 Films", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971, pp. 389-396 (Springer-Verlag, Berlin)

(185) 池田隆英, 徳山巍, 越本尚, 森田忠久："イオン打込みによるシリコン結晶の欠陥", 第16回応物関係講演会予稿 31p-GE-13 (1969)

(186) T. Tsuchimoto and I.V. Mitchell : "Channeling Studies of Defects in Silicon Generated by H, He, B, N and P Ion Implantations", Proc. 1st Conf. Solid State Devices, Tokyo, 1969, Suppl. J. Japan Soc. Appl. Phys. 39, pp. 82-87 (1970)

(187) S. Furukawa and H. Ishiwara : "Vacancy Distribution Theory for Ion-Implanted Target", Proc. 2nd Conf. Solid State Devices, Tokyo, 1970, Suppl. J. Japan. Soc. Appl. Phys. 40, pp. 3-8 (1971)

(188) R.R. Hart and O.J. Marsh : "Lattice Disoder Produced in Si by 40-keV Boron and its Effect on Electrical Behavior", Appl. Phys. Letters, 15, 7, pp. 206-208 (1 Oct. 1969)

(189) S.T. Picraux, W. H. Weisenberger, and F.L. Vook : "Low Temperature Channeling Measurements of Ion Implantation Lattice Disorder in Single Crystal Silicon", Radiation Effects 7, pp. 101-107 (1971)

(190) D.K. Brice : "Spatial Distribution of Energy Deposited into Atomic Processes in Ion-Implanted Silicon", Proc. 1st Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Thousand Oaks, 1970, pp. 101-111 (Gordon and Breach, N.Y.)

(191) B.L. Crowder : "The Role of Damage in the Annealing Characteristics of Ion Implanted Si", J. Electrochem. Soc. Solid State Sci. 117, 5, pp. 671-674 (May, 1970)

(192) K. Björkqvist, B. Domeij, L. Eriksson, A. Fontell and J.W. Mayer : "Lattice Location of Dopant Elements Implanted into Ge", Appl. Phys. Letters 13, 11, pp. 379-381 (1 Dec., 1968)

(193) O. Meyer and J.W. Mayer : "Enhanced Outdiffusion in Ion Implanted Silicon", Phys. Letters, 31 A, 7, pp. 387-388 (6 April, 1970)

(194) J. A. Carins, R. S. Nelson, and J.S. Briggs : "The Use of Ion-Induced X-Rays to Investigate the Concentration Distribution and Atom Location of Bron-Implanted Silicon", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971, pp. 299-306 (Springer-Verlag, Berlin)

(195) J.A. Davies, J.D. McIntyre, R.L. Cushing and M. Lounsbury :" The Range of Alkali Metal Ions of Kiloelectron Volt Energies in Aluminum", Can. J. Chem. 38, pp. 1535-1546 (1960)

(196) J.L. Whitton, G. Carter, J. H. Freeman, and G.A. Gard : "The Implantation Profiles of 10, 20 and 40 keV ^{85}Kr in Gallium Arsenide", J. Material Sci. 4, pp. 208-217 (1969)

(197) Y. Akasaka and K. Horie : "Lateral Spread of Boron Ions Implanted in Silicon", Appl. Phys. Letters, 21, 4, pp. 128-129 (15 Aug. 1972)

(198) D.H. Lee, R.R. Hart, and O.J. Marsh : "Effects of Al Films on Ion-Implanted Si", Appl. Phys. Letters, 20, 2, pp. 73-75 (Jan., 1972)

(199) S.T. Picraux and F.L. Vook : "Multi Layer Thin-Film Analysis by Ion Backscattering", Appl. Phys. Letters, 18, 5, pp.191-194 (1 March, 1971)

(200) S.T. Picraux,: "Ion-Channeling Studies of Epitaxial Layers", Appl. Phys. Letters, 20, 2, pp.91-93 (15 Jan., 1972)

(201) T. Gyulai, J.W. Mayer, and I.V. Mitchell : "Out-diffusion through Silicon Oxide and Silicon Nitride Layers on Gallium Arsenide", Appl. Phys. Letters,17, 8, pp. 332-334 (15 Oct., 1970)

(202) R.R. Hart, D.H. Lee, and O.J. Marsh ; "Enhanced Migration of Implanted Sb and In in Si Covered with Evaporated Al", Appl. Phys. Letters, 20, 2, pp. 76-77 (15 Jan., 1972)

(203) F.H. Eisen, G.J. Clark, J. Bøttiger, and J.M. Poate : "Stopping Power of Energetic Helium Ions Transmitted through Thin Silicon Crystals in Channeling and Random Directions", Rad. Effects, 13, pp.93-100, (1972)

(204) E. Bøgh : "Defect Studies in Crystals by Means of Channeling", Can. J. Phys., 46, pp. 653-662 (1968)

(205) E.P. EerNisse : "Sensitive Technique for Studying Ion-Implantation Damage", Appl. Phys. Letters, 18, 12, p. 581 (15 June, 1971)

(206) E.P. EerNisse : "Investigation of Ion Implantataion Damage with Stress Measurements", Proc. 2nd Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Garmisch-Partenkirchen, 1971, pp. 17-22 (Springer-Verlag, Berlin)

(207) T.C. McGill, S.L. Kurtin, and G.A. Shifrin : "Optical Reflection Studies of Damage in Ion Implanted Silicon", J. Appl. Phys. 41, 1, pp. 246-251 (Jan. 1970)

(208) H.J. Stein and W. Beezhold : "Localized Modes and Divacancy Absorption in Oxgen Ion Implanted Si", Appl. Phys. Letters, 17, 10, pp. 442-444 (15 Nov., 1970)

(209) S. Kishino and A. Noda : "Observation of Lattice Defects in Ion-Implanted Si Wafer by A Double Crystals Spectrometer Method", 4th Conf. Solid State Devices Tokyo, 1972, No. 4-2

(210) J.R. Parsons, Phil. Mag. 12, 1159 (1965)

(211) S.M. Davidson and G.R. Booker : "Damage Produced by Ion Implantation in Silicon", Proc. 1st Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Thousand Oaks, 1970, pp. 51-61 (Gordon and Breach, N.Y.)

(212) B.L. Crowder and R.S. Title : "The Distribution of Damage Produced by Ion Implantation of Silicon at Room Temperature", Proc. 1st. Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Thousand Oaks, 1970, pp. 87-99 (Gordon and Breach, N.Y.)

(213) B.J. Masters, G. Jung, B.L. Crowder, and J.M. Fairfield : "Radiochemical Determination of Damage Profiles in Ion Implanted Silicon", IBM Technical Report TR 22.1020 (20 June, 1970)

(214) R.R. Hart and O.J. March : "Changes of Optical Reflectivity (1.8 to 2.2 eV) Induced by 40 keV Antimony Ion Bombardment of Silicon", Appl. Phys. Letters, 14, 7, pp. 225-226 (1 April, 1969)

(215) D.F. Daly and K.A. Pickar : "Electron Paramagnetic Resonance in Ion Implanted Silicon", Appl. Phys. Letters, 15, 8, pp. 267-269 (15 Oct., 1969)

(216) 弁田公三, 村上浩一, 難波進: "イオン注入材料のESR", 理研シンポジウム "半導体へのイオン注入", pp. 49-51 (1972年2月)

(217) B.J. Masters, J.M. Fairfield, and B.L. Crowder : "Radiochemical Determination of Damage Profiles in Silicon", Proc. 1st Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Thousand Oaks, 1970, pp. 81-85 (Gordon and Breach, N.Y.)

(218) T.W. Sigmon and J.F. Gibbons : "Hot Electron Studies of Lattice Damage Created in Silicon by Implantation of 2.8 MeV Proton", Proc. 1st Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Thousand Oaks, 1970, pp. 131-137 (Gordon and Breach, N.Y.)

(219) K.A. Pickar and J.V. Dalton : "Lifetime Effects in Ion Implanted Silicon", Proc. 1st Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Thousand Oaks, 1970, pp. 125-130 (Gordon and Breach, N.Y.)

(220) L.J. van der Pauw : "A Method of Measuring Specific Resistivity and Hall Effect of Discs of Arbitrary Shape", Philips Res. Repts, 13, 1-9, (Feb. 1958)

(221) J.M. Shanon, R.A. Ford, and G.A. Gard : "Annealing Characteristics of Highly Doped Ion Implanted Phosphorus Layers in Silicon", Proc. 1st Intern. Conf. Ion Implantation in Semiconductors, Thousand Oaks, 1970, pp. 167-171 (Gordon and Breach, N.Y.)

本研究に関する発表文献

論　文

(1) S.Furukawa and H.Ishiwara;"Vacancy Distribution Theory for Ion-Implanted Target", Proc. 2nd Conf. Solid State Devices, Tokyo, 1970, Suppl. J. Japan Soc. Appl. Phys., 40, pp.3-8 (1971)

(2) S.Furukawa, H.Matsumura, and H.Ishiwara;"Theoretical Consideration on Lateral Spread of Implanted Ions", Japan. J. Appl. Phys., 11, 2, pp.134-142 (Feb. 1972)

(3) S.Furukawa and H.Ishiwara; "Range Distribution Theory Based on Energy Distribution of Implanted Ions", J. Appl. Phys. 43, 3, pp.1268-1273 (March 1972)

(4) H. Ishiwara, S.Furukawa, H.Matsumura, and N.Natsuaki: "Study on Three-Dimensional Distribution of Implanted Ions by He^+ Backscattering Technique",Proc. 4th Conf. Solid State Devices, Tokyo, 1972, Suppl. J. Japan Soc. Appl. Phys. 42, (1973) in press.

(5) 石原，古川："多層構造基板中の注入イオンの飛程分布に関する理論的検討" 信学会論文誌、C ~~掲載決定~~ 56-C, 3, pp. 411-418

Short Note

(6) S.Furukawa and H.Ishiwara: "Mass Dependence of Critical Amorphizing Dose in Ion Implantation", Japan. J. Appl. Phys. 11, 7, pp.1062-1063 (July 1972)

研究会発表

(1) 古川, 石原:"イオンRangeに関する理論的考察", 昭和45年理研シンポジウム"半導体へのイオン注入" PP.23－29, (3月, 1970)

(2) 古川, 石原:"イオンRangeに関する一解析法", 昭和46年理研シンポジウム"半導体へのイオン注入, イオン注入した半導体の格子欠陥" PP. 165～172, (2月, 1970)

(3) S.Furukawa, H.Matsumura, and H.Ishiwara; "Lateral Distribution Theory of Implanted Ions", Proc. U.S.-Japan Sem. on Ion Implantation in Semiconductors, S.Namba, Ed. Kyoto, Japan; Japan Soc. for the Promotion of Sci. (1972)

(4) 古川, 夏秋, 石原, 松村:"イオン注入により生じるSi単結晶中の欠陥分布の測定と解析法の検討", 物性研短期研究会"荷電粒子のチャンネリング"および"ブロッキング"効果の基礎と応用" (11月, 1971)

(5) 古川, 松村, 石原:"注入イオンの横方向拡がり" 信学会半トラ研資料, SSD71－62, (1月, 1972)

(6) 石原, 古川:"多層構造基板中の欠陥分布とイオン分布", 昭和47年理研シンポジウム"半導体へのイオン注入" PP.25－32, (2月, 1972)

(7) 古川, 石原, 松村, 夏秋:"イオン注入されたSiのアニール特性のHe後方散乱法による検討" 電気学会, 電装研資料 EDD－72－49 (10月, 1972)

学会講演

(1) 古川，石原：“イオン・インプラントされた粒子のエネルギー分布”
昭和44年度、信学全大，No，691 (9月，1969)

(2) 古川，石原：“多重数値積分によるイオン注入粒子の分布の解析”
昭和45年度，電4連大，No，1655 (3月，1970)

(3) 古川，石原：“多層構造基板に注入されたイオンのRange分布”
昭和45年度，信学全大，No，716 (8月，1970)

(4) 古川，石原，松村：“化合物半導体中の理論射影Range分布”
第31回応物学会，No，10p-M-3， (10月，1970)

(5) 古川，石原：“イオン注入におけるAmorphous限界注入量”
第18回応物関係連合講演会，No，31a-E-8 (3月，1971)

(6) 古川，石原：“注入イオンのガウス分布からのずれ”
昭和46年度，信学全大，No，880 (4月，1971)

(7) 古川、松村，石原：“イオン注入された粒子の横方向ひろがり”
昭和46年度，信学全大，No，881 (4月，1971)

(8) 古川，石原：“イオン注入による多層構造基板中の格子欠陥分布”
第32回応物学会，No，3p-B-10 (11月，1971)

(9) 古川，松村，石原：“イオン注入粒子の2次元分布”
第32回応物学会，No，3p-B-11， (11月，1971)

(10) 古川，松村，石原，夏秋：“傾けた基板へのイオン注入”
第19回応物関係連合講演会，No，31P-C-1 (3月，1972)

(11) 古川，夏秋，石原，松村，遠藤：“イオン注入Si基板中の欠陥分布の1.5MeV He^+後方散乱法による測定”
第19回応物関係連合講演会 No，31p-C-2 (3月，1972)

(12) 古川，石原，夏秋，松村：“イオン注入されたSiのアニール特性の後方散乱法による検討”
第19回応物関係連合講演会，No, 31p-C-3，(3月，1972)

(13) 古川，夏秋，石原，松村：“Si^+注入したSi単結晶中の欠陥分布とdechanneling” 1972年春物理学会分科会，No, 8a-Y-1，(4月，1972)

(14) 古川，井上，石原：“イオン注入時の表面温度に関する考察”
第33回応物学会，No, 1a-C-1，(10月，1972)

(15) 古川，松村，石原，夏秋：“^4He後方散乱法による注入イオンの横方向拡がりの測定”，第33回応物学会，No, 1p-C-1 (10月 1972)

その他の発表文献

(1) 古川，石原：“リード形アバランシダイオードの近似解析法の一提案とアドミタンスの実測”
信学論-C，52-C, 11，pp. 727-734，(11月，1969)

(2) 古川，石原：N^+PP^+形アバランシダイオードの小信号アドミタンスの直接測定” 信学会電装研資 ED68-47 (2月，1969)

(3) 古川，石原：“アバランシダイオードのアドミタンスの直接測定”
昭和44年度，電4連大，No, 1988 (3月，1969)

付録-A　飛程のm次モーメントに関する厳密解の導出

ここでは，核の相互作用ポテンシャルが r^{-s} に比例し，かつ，軌道電子によるエネルギー損失が無視できる場合の飛程のm次のモーメントを求める。（以下，基板は1種類の元素から成立っていると仮定する。）

核の相互作用ポテンシャルが r^{-s} に比例する場合，衝突断面積 $d\sigma_n$ は式（A.1）で与えられるから[97]，式（3.15）～（3.17）の規格化量を用いると，式（3.3）は式（A.2）となる。

$$d\sigma_n = -\pi a^2 \frac{\lambda_s}{2t^{1+1/s}} dt \qquad (A.1)$$

$$\frac{\partial P(\rho,\varepsilon)}{\partial \rho} = \frac{\lambda_s}{\gamma} \int_0^{\varepsilon^2} \frac{dt}{2t^{1+1/s}} \left\{ P\left(\rho, \varepsilon - \frac{\gamma t}{\varepsilon}\right) - P(\rho,\varepsilon) \right\} \qquad (A.2)$$

ここで，更に以下の変換を行なう。

$$r = \lambda_s \rho / 2\gamma\varepsilon^{2/s} \qquad (3.20)$$

$$P(r,\varepsilon) = \frac{2\gamma\varepsilon^{2/s}}{\lambda_s} P(\rho,\varepsilon) = \frac{2\gamma\varepsilon^{2/s}}{\lambda_s} P\left(\frac{2\gamma\varepsilon^{2/s}}{\lambda_s} r, \varepsilon\right) \qquad (A.3)$$

式（3.20），（A.3）を式（A.2）に代入し，$y = t/\varepsilon^2$ と置くと，

$$\frac{\partial P(r,\varepsilon)}{\partial r} = \int_0^1 \frac{dy}{y^{1+1/s}} \left\{ P\left(\frac{r}{(1-\gamma y)^{2/s}}, \varepsilon(1-\gamma y)\right) / (1-\gamma y)^{\frac{2}{s}} - P(r,\varepsilon) \right\} \qquad (A.4)$$

となる。ここで，式（3.1），（3.2）に対応して次式が成立つ。

$$\int_0^\infty P(r,\varepsilon)\, dr = 1 \qquad (A.5)$$

$$\langle r^m \rangle = \int_0^\infty r^m P(r, \varepsilon)\, dr \qquad (A.6)$$

式(A.4)の両辺にr^mを掛けて積分し，式(A.6)を代入すると，

$$m \langle r^{m-1} \rangle = \langle r^m \rangle \cdot I(\gamma, m, s) \qquad (3.19)$$

$$I(\gamma, m, s) = \int_0^1 \frac{dy}{y^{1+1/s}} \left\{ 1 - (1-\gamma y)^{\frac{2m}{s}} \right\} \qquad (3.21)$$

となる。

付録－B　基板中のイオンのエネルギー分布および飛程分布を求めるための計算機プログラム

計算条件：

- 50 keV $^{40}Ar \rightarrow Si$
- Thomas－Fermi ポテンシャル
- 電子阻止能考慮
- $\delta R = 27.1$ Å

結果は，図4－10，図4－11に示す。

```
      PROGRAM IMOTTA
      E.D. OF 50KEV AR IN SI, T-F POT. SE, 10 LAYERS, NEW TNSE
      COMMON X(800),EUELX(60),EUX(60),ELX(60),GUZ(6),AEZ(6,60),TE0,AS1,
     1US1,CJ,CK,CE,CR,U,GAMMA,UU,IIA,IIB,IIC,EEA,EEB,EEC,SN0,SQI,TNSK,
     2D1,D2,D3,R,C1,EC1,KC1,UZ,EMAX,EMIN,KMAX,KMIN,YMAX,YMIN,EMAX0,EMIN0
      COMMON GUX(60,2),TNSX(60),P(14),Q(14),XX(15),EDX(60)
      COMMON /MESH/ MP,MQ,MR,MS,MT
      DIMENSION Y(800),AF(15),AS(15),AFF(15)
      MP=20
      MQ=16
      MR=12
      MS=12
      MT=16
      PAI=3.141593
      A=0.1315336E-10
      B=0.4842868E-10
      CE=1.495517E-2
      U=28.09/40.
      GAMMA=4.*U/(U+1.)**2
      TE0=7.421377E-2
      CR=PAI*A*A*GAMMA
      R=A**2/B**2/2./GAMMA/CE
      UU=((U-1.)/(U+1.))**2
      ASSNC=CR/CE/B/B/3.141593
      D1=0.01
      D2=0.05
      D3=0.2
      IIA=500
      IIB=600
      IIC=800
      EEA=50.
      EEB=45.
      EEC=40.
      II1=501
      II2=501
      GUZ(1)=0.53
      GUZ(2)=0.8
      GUZ(3)=0.9
      GUZ(4)=0.95
      GUZ(5)=0.99
      GUZ(6)=0.997
      READ 5,800) (EUELX(I),I=1,60)
  800 FORMAT(6F11.5)
      READ(5,700) (P(I),I=1,14),(Q(I),I=1,14)
  700 FORMAT(7F11.5)
      READ(5,757) (XX(I),I=1,15),(AF(I),I=1,15),(AS(I),I=1,15)
  757 FORMAT(5F10.5)
      M=1
      BSQ=B*B
      BA=BSQ/A/A
```

```
      DO 160 I=1,15
  160 AFF(I)=AF(I)/XX(I)**2
   51 E=EUELX(M)
      N=1
  172 EPS0=CE*E
      I=14
      AV=0.
      AQ1=EPS0
  167 IF(XX(I).LT.EPS0) GO TO 175
      I=I-1
      IF(I.EQ.0) GO TO 166
      GO TO 167
  175 ASSN=AS(I)+(AS(I+1)-AS(I))*ALOG(EPS0/XX(I))/ALOG(XX(I+1)/XX(I))
  164 AT=ALOG(AFF(I)/AFF(I+1))/ALOG(XX(I)/XX(I+1))
      AC=AFF(I)/XX(I)**AT
      AV=AV+AC/(AT+1.)*(AQ1**(AT+1.)-XX(I)**(AT+1.))
      IF(AV.GE.BA) GO TO 163
      I=I-1
      IF(I.EQ.0) GO TO 165
      AQ1=XX(I+1)
      GO TO 164
  163 EP0=(XX(I)**(AT+1.)+(AT+1.)*(AV-BA)/AC)**(1./(AT+1.))
      GUX(M,N)=1.-(EP0/EPS0)**2
      GO TO 170
  165 GUX(M,N)=1.-1./EPS0**2/((BA-AV)*0.65/1.43+1./XX(1)**(0.65))**(1./
     10.325)
      GO TO 170
  166 GUX(M,N)=1.-1./(0.65/1.43*BA*EPS0**(0.65)+1.)**(1./0.325)
      ASSN=1.43/1.35*EPS0**(0.35)
  170 IF(N.EQ.2) GO TO 171
      EDX(M)=E-TE0*SQRT(E)/2.-ASSN*ASSNC/2.
      E=EDX(M)
      TE=TE0*SQRT(E)
      N=2
      GO TO 172
  171 AA=SQRT(1.-GUX(M,2))
      EP=EPS0*AA
      IF(EP.LT.XX(1)) GO TO 162
      DO 161 I=2,15
      IF(EP.LT.XX(I)) GO TO 173
  161 CONTINUE
  173 BB=AS(I-1)+(AS(I)-AS(I-1))*ALOG(EP/XX(I-1))/ALOG(XX(I)/XX(I-1))
      GO TO 174
  162 BB=1.43/1.35*EP**(0.35)
  174 TNSX(M)=CR*AA*BB/CE/BSQ/3.141593
      ELX(M)=(GAMMA*GUX(M,1)+UU)*EUELX(M)-TE-TNSX(M)
      EUX(M)=UU*EUELX(M)-TE-TNSX(M)
      M=M+1
      IF(M.GE.61) GO TO 56
      GO TO 51
```

```
 56 I=2
 91 IF(ELX(I).GE.0.) GO TO 90
    I=I+1
    GO TO 91
 90 C1=EUELX(I-1)+(EUELX(I)-EUELX(I-1))*ELX(I-1)/(ELX(I-1)-ELX(I))
    I=2
 81 IF(EUX(I).GE.0.) GO TO 80
    I=I+1
    GO TO 81
 80 C2=EUELX(I-1)+(EUELX(I)-EUELX(I-1))*EUX(I-1)/(EUX(I-1)-EUX(I))
    KC1=IIB+IFIX((EEC-C1)/D3)+1
    EC1=EEC-D3*FLOAT(KC1-IIB)
    WRITE(6,100) C2,C1,EC1,KC1
100 FORMAT(1H ,3(E15.7,5X),I4)
    WRITE(6,93) (EUELX(I),I=1,60),(EUX(I),I=1,60),(ELX(I),I=1,60),
   1(GUX(I,1),I=1,60),(TNSX(I),I=1,60),(EDX(I),I=1,60),(GUX(I,2),I=1,
   260)
 93 FORMAT(1H0,6E20.7)
    DO 780 I=1,6
    UGUZ=UU+GAMMA*GUZ(I)
    DO 780 J=1,60
    OMAKE=EUELX(J)
780 AEZ(I,J)=EUELX(J)*UGUZ-TNSE(OMAKE)
    DO 782 I=1,6
    WRITE(6,781) (AEZ(I,J),J=1,60)
781 FORMAT(1H ,6E20.7)
782 CONTINUE
    LMN=1
    WRITE(6,101) LMN
    S1=0.
    EPS=EPS0
    S11=0.
    E0=EEA
    GU=GUA(E0)
    TNSTE=TNSE(E0)
    GUD=1.-GU
    JX=1
    RR=R/E0/E0
    EEMIN=UU*E0-TNSTE
    EEMAX=(1.-GUD*GAMMA)*E0-TNSTE
    YYMIN=RR*SF(EPS)
    YYMAX=RR*SF(EPS*SQRT(GUD))/GUD**1.5
    KKMAX=IFIX((EEA-EEMAX)/D1)+1
    KKMIN=IIB+IFIX((EEC-EEMIN)/D3)
    EEMAX0=EEA-D1*FLOAT(KKMAX)
    EEMIN0=EEC-D3*FLOAT(KKMIN-IIB)
    WRITE(6,100) YYMAX,EEMAX,EEMAX0,KKMAX
    WRITE(6,100) YYMIN,EEMIN,EEMIN0,KKMIN
    DO 783 I=KKMAX,IIA
    E=EEA-FLOAT(I)*D1
```

```
      GZD=(1.-(E+TNSTE)/E0)/GAMMA
  783 Y(I)=RR*SF(EPS*SQRT(GZD))/GZD**1.5
      DO 784 I=III,IIB
      E=EEB-FLOAT(I-IIA)*D2
      GZD=(1.-(E+TNSTE)/E0)/GAMMA
  784 Y(I)=RR*SF(EPS*SQRT(GZD))/GZD**1.5
      DO 785 I=II2,KKMIN
      E=EEC-FLOAT(I-IIB)*D3
      GZD=(1.-(E+TNSTE)/E0)/GAMMA
  785 Y(I)=RR*SF(EPS*SQRT(GZD))/GZD**1.5
      GO TO 7
   30 IF(S11.EQ.0.0) GO TO 201
      JZ=4
      IF(EMAX.LT.C1) GO TO 31
      GO TO 203
  201 IF(EMIN.LT.C2) GO TO 204
      JZ=1
      GO TO 203
  204 IF(EMIN.LT.C1) GO TO 205
      JZ=2
      GO TO 203
  205 JZ=3
  203 CK=-0.1
      LMN=LMN+1
      WRITE(6,101) LMN
  101 FORMAT(1H ,//5X,19HENERGY DISTRIBUTION,I2)
      EEMAX=(UU+GUA(EMAX)*GAMMA)*EMAX-TNSE(EMAX)
      IF(EEMAX.LT.EEB) GO TO 788
      KKMAX=IFIX((EEA-EEMAX)/D1)+1
      EEMAX0=EEA-D1*FLOAT(KKMAX)
      JX=1
      GO TO 789
  788 IF(EEMAX.LT.EEC) GO TO 790
      KKMAX=IFIX((EEB-EEMAX)/D2)+III
      EEMAX0=EEB-D2*FLOAT(KKMAX-IIA)
      JX=2
      GO TO 789
  790 KKMAX=IFIX((EEC-EEMAX)/D3)+II2
      EEMAX0=EEC-D3*FLOAT(KKMAX-IIB)
      JX=3
  789 YYMAX=0.
      WRITE(6,100) YYMAX,EEMAX,EEMAX0,KKMAX
      CJ=UU*EMAX-TNSE(EMAX)
      IF(JZ.LE.3) GO TO 212
      KKMIN=IIC
      EEMIN0=0.
      CALL SUBUS1
      CALL SUBAS1
      S1=AS1+US1
      WRITE(6,998) AS1,US1,S1
```

```
998 FORMAT(1H ,3(5X,E15.7))
220 ISE=KKMAX
    IF(JX.GE.2) GO TO 786
    DO 787 I=KKMAX,IIA
    E=EEA-FLOAT(I)*D1
    CALL EUEL(E,EU,EL)
787 Y(I)=SEKIBN(E,EU,EL)
    ISE=IIA
    GO TO 791
786 IF(JX.EQ.3) GO TO 793
791 DO 792 I=ISE,IIB
    E=EEB-FLOAT(I-IIA)*D2
    CALL EUEL(E,EU,EL)
792 Y(I)=SEKIBN(E,EU,EL)
    ISE=IIB
793 DO 794 I=ISE,KKMIN
    E=EEC-FLOAT(I-IIB)*D3
    CALL EUEL(E,EU,EL)
794 Y(I)=SEKIBN(E,EU,EL)
    GO TO
212 CK=(UU+GUA(EMIN)*GAMMA)*EMIN-TNSE(EMIN)
    IF(JZ.LE.2) GO TO 214
    CALL SUBUS1
    CALL SUBAS1
    S1=AS1+US1
    WRITE(6,998) AS1,US1,S1
    KKMIN=IIC
    EEMIN0=0.
    GO TO 220
214 IF(JZ.EQ.1) GO TO 215
    CALL SUBAS1
    S1=AS1
    KKMIN=IIC
    EEMIN0=0.
    GO TO 220
215 EEMIN=UU*EMIN-TNSE(EMIN)
    KKMIN=IFIX((EEC-EEMIN)/D3)+IIB
    EEMIN0=EEC-D3*FLOAT(KKMIN-IIB)
    YYMIN=0.
    WRITE(6,100) YYMIN,EEMIN,EEMIN0,KKMIN
    S1=0.0
    GO TO 220
  7 S2=0.0
    S5=0.
    S=(YYMAX+Y(KKMAX))*(EEMAX-EEMAX0)/2.
    S6=(YYMAX*EEMAX+Y(KKMAX)*EEMAX0)*(EEMAX-EEMAX0)/2.
    ISE=KKMAX
    IF(JX.GE.2) GO TO 795
    DO 21 I=KKMAX,IIA
    S2=S2+Y(I)
```

```
 21 S5=S5+Y(I)*(EEA-D1*FLOAT(I))
    S=S+D1*(S2-(Y(ISE)+Y(IIA))/2.)
    S6=S6+D1*(S5-(Y(KKMAX)*EEMAX0+Y(IIA)*EEB)/2.)
    S2=0.
    S5=0.
    ISE=IIA
    GO TO 796
795 IF(JX.EQ.3) GO TO 797
796 DO 20 I=ISE,IIB
    S2=S2+Y(I)
 20 S5=S5+Y(I)*(EEB-D2*FLOAT(I-IIA))
    S=S+D2*(S2-(Y(ISE)+Y(IIB))/2.)
    S6=S6+D2*(S5-(Y(ISE)*(EEB-D2*FLOAT(ISE-IIA))+Y(IIB)*EEC)/2.)
    S2=0.
    S5=0.
    ISE=IIB
797 DO 22 I=ISE,KKMIN
    S2=S2+Y(I)
 22 S5=S5+Y(I)*(EEC-D3*FLOAT(I-IIB))
    S=S+D3*(S2-(Y(ISE)+Y(KKMIN))/2.)
    S6=S6+D3*(S5-(Y(ISE)*(EEC-D3*FLOAT(ISE-IIB))+Y(KKMIN)*EEMIN0)/2.)
    S=S+S1
    S1=S1*(1.-S11)/S
    S6=S6*(1.-S11)/S
    YYMAX=YYMAX/S*(1.-S11)
    DO 155 I=KKMAX,KKMIN
155 Y(I)=Y(I)*(1.-S11)/S
    S=S+S11
    S11=S11+S1
    WRITE(6,103) S1,S11,S,S6
    ISE=KKMAX
    IF(JX.GE.2) GO TO 798
    WRITE(6,103) (Y(I),I=KKMAX,IIA)
    ISE=II1
798 IF(JX.EQ.3) GO TO 799
    WRITE(6,103) (Y(I),I=ISE,IIB)
    ISE=II2
799 WRITE(6,103) (Y(I),I=ISE,KKMIN)
103 FORMAT(1H0,5(E15.7,5X))
151 KMAX=KKMAX
    EMAX=EEMAX
    YMAX=YYMAX
    EMAX0=EEMAX0
    EMIN0=EEMIN0
    EMIN=EEMIN
    KMIN=KKMIN
    YMIN=YYMIN
 71 MAX=KKMAX-1
    DO 23 I=1,MAX
 23 X(I)=0.0
```

```
      IF(S1.GT.0.0) GO TO 25
      MIN=KMIN+1
      DO 24 I=KMAX,KMIN
   24 X(I)=Y(I)
      DO 29 I=MIN,IIC
   29 X(I)=0.0
      GO TO 30
   25 DO 27 I=KMAX,IIC
   27 X(I)=Y(I)
      IF(KMAX.GT.500) GO TO 5
      GO TO 30
    5 D1=0.05
      D2=0.2
      D3=0.05
      IIA=200
      IIB=350
      IIC=550
      II1=201
      II2=351
      EEB=40.
      EEC=10.
      KC1=IIB+IFIX((EEC-C1)/D3)+1
      EC1=EEC-D3*FLOAT(KC1-IIB)
      WRITE(6,11) KC1,EC1
   11 FORMAT(1H0,12HJYOSU HENKOH,I5,E15.7)
      KMAX=KMAX-400
      MAX=KMAX-1
      DO 8 I=1,MAX
    8 X(I)=0.
      DO 6 I=KMAX,IIB
    6 X(I)=X(I+400)
      DO 9 I=751,800
      J=(I-750)*4+350
      X(J-3)=(X(I)+3.*X(I-1))/4.
      X(J-2)=(X(I)+X(I-1))/2.
      X(J-1)=(3.*X(I)+X(I-1))/4.
    9 X(J)=X(I)
      GO TO 30
   31 WRITE(6,121)
  121 FORMAT(1H ,12HZENBU TOMARU)
   70 STOP
      END
```

```
      GO TO 9
    8 SUMB=SF(CE*EB*SQRT(GUDB))/EB/EB/GUDB**1.5*HEIT(EB)
      SEKIBN=H/3.*R*(SUM+4.*SF(CE*EA*SQRT(GUDA))/EA/EA/GUDA**1.5*
     1HEIT(EA)+SUMB)+SEKIBN
      IF(GUMAX.LE.GUZ(2)) RETURN
      SUM=SUMB
      QEU=QEL
      GO TO 10
    7 IF(GUMIN.GT.GUZ(3)) GO TO 11
      QEU=EU
   10 QEL=EL
      IF(GUMAX.GT.GUZ(3)) QEL=EZ(E1,3)
      H=(QEU-QEL)/FLOAT(2*MR)
      I=1
   13 EA=QEU-FLOAT(2*I-1)*H
      EB=QEU-FLOAT(2*I)*H
      GUDA=(1.-(E1+TNSE(EA))/EA)/GAMMA
      GUDB=(1.-(E1+TNSE(EB))/EB)/GAMMA
      IF(I.EQ.MR) GO TO 12
      SUM=SUM+4.*SF(CE*EA*SQRT(GUDA))/EA/EA/GUDA**1.5*HEIT(EA)+2.*SF(CE*
     1EB*SQRT(GUDB))/EB/EB/GUDB**1.5*HEIT(EB)
      I=I+1
      GO TO 13
   12 SUMB=SF(CE*EB*SQRT(GUDB))/EB/EB/GUDB**1.5*HEIT(EB)
      SEKIBN=H/3.*R*(SUM+4.*SF(CE*EA*SQRT(GUDA))/EA/EA/GUDA**1.5*
     1HEIT(EA)+SUMB)+SEKIBN
      IF(GUMAX.LE.GUZ(3)) RETURN
      SUM=SUMB
      QEU=QEL
      GO TO 14
   11 IF(GUMIN.GT.GUZ(4)) GO TO 15
      QEU=EU
   14 QEL=EL
      IF(GUMAX.GT.GUZ(4)) QEL=EZ(E1,4)
      H=(QEU-QEL)/FLOAT(2*MS)
      I=1
   17 EA=QEU-FLOAT(2*I-1)*H
      EB=QEU-FLOAT(2*I)*H
      GUDA=(1.-(E1+TNSE(EA))/EA)/GAMMA
      GUDB=(1.-(E1+TNSE(EB))/EB)/GAMMA
      IF(I.EQ.MS) GO TO 16
      SUM=SUM+4.*SF(CE*EA*SQRT(GUDA))/EA/EA/GUDA**1.5*HEIT(EA)+2.*SF(CE*
     1EB*SQRT(GUDB))/EB/EB/GUDB**1.5*HEIT(EB)
      I=I+1
      GO TO 17
   16 SUMB=SF(CE*EB*SQRT(GUDB))/EB/EB/GUDB**1.5*HEIT(EB)
      SEKIBN=H/3.*R*(SUM+4.*SF(CE*EA*SQRT(GUDA))/EA/EA/GUDA**1.5*
     1HEIT(EA)+SUMB)+SEKIBN
      IF(GUMAX.LE.GUZ(4)) RETURN
      SUM=SUMB
```

```
      FUNCTION SEKIBN(E1,EU,EL)
      COMMON X(800),EUELX(60),EUX(60),ELX(60),GUZ(6),AEZ(6,60),TE0,AS1,
     1US1,CJ,CK,CE,CR,G,GAMMA,UL,IIA,IIB,IIC,EEA,EEB,EEC,SN0,SGI,TNSK,
     2D1,D2,D3,R,C1,EC1,KC1,JZ,EMAX,EMIN,KMAX,KMIN,YMAX,YMIN,EMAX0,EMIN0
      COMMON GUX(60,2),TNSX(60),P(14),Q(14),XX(15),EDX(60)
      COMMON /MESH/ MP,MQ,MR,MS,MT
      GUMAXD=(1.-(E1+TNSE(EL))/EL)/GAMMA
      GUMAX=1.-GUMAXD
   65 IF(E1.LE.CJ) GO TO 1
      GUMIND=(1.-(E1+TNSE(EU))/EU)/GAMMA
      GO TO 2
    1 GUMIND=1.
    2 GUMIN=1.-GUMIND
      SUM=SF(CE*EU*SQRT(GUMIND))/EU/EU/GUMIND**1.5*HEIT(EU)
      SEKIBN=0.
      IF(GUMIN.GT.GUZ(1)) GO TO 3
      QEL=EL
      IF(GUMAX.GT.GUZ(1)) QEL=EZ(E1,1)
      H=(EU-QEL)/FLOAT(2*MP)
      I=1
    5 EA=EU-FLOAT(2*I-1)*H
      EB=EU-FLOAT(2*I)*H
      GUDA=(1.-(E1+TNSE(EA))/EA)/GAMMA
      GUDB=(1.-(E1+TNSE(EB))/EB)/GAMMA
      IF(I.EQ.MP) GO TO 4
      SUM=SUM+4.*SF(CE*EA*SQRT(GUDA))/EA/EA/GUDA**1.5*HEIT(EA)+2.*SF(CE*
     1EB*SQRT(GUDB))/EB/EB/GUDB**1.5*HEIT(EB)
      I=I+1
      GO TO 5
    4 SUMB=SF(CE*EB*SQRT(GUDB))/EB/EB/GUDB**1.5*HEIT(EB)
      SEKIBN=H/3.*R*(SUM+4.*SF(CE*EA*SQRT(GUDA))/EA/EA/GUDA**1.5*
     1HEIT(EA)+SUMB)
      IF(GUMAX.LE.GUZ(1)) RETURN
      SUM=SUMB
      QEU=QEL
      GO TO 6
    3 IF(GUMIN.GT.GUZ(2)) GO TO 7
      QEU=EU
    6 QEL=EL
      IF(GUMAX.GT.GUZ(2)) QEL=EZ(E1,2)
      H=(QEU-QEL)/FLOAT(2*MQ)
      I=1
    9 EA=QEU-FLOAT(2*I-1)*H
      EB=QEU-FLOAT(2*I)*H
      GUDA=(1.-(E1+TNSE(EA))/EA)/GAMMA
      GUDB=(1.-(E1+TNSE(EB))/EB)/GAMMA
      IF(I.EQ.MQ) GO TO 8
      SUM=SUM+4.*SF(CE*EA*SQRT(GUDA))/EA/EA/GUDA**1.5*HEIT(EA)+2.*SF(CE*
     1EB*SQRT(GUDB))/EB/EB/GUDB**1.5*HEIT(EB)
      I=I+1
```

```
      QEU=QEL
      GO TO 18
   15 IF(GUMIN.GT.GUZ(5)) GO TO 19
      QEU=EU
   18 QEL=EL
      IF(GUMAX.GT.GUZ(5)) QEL=EZ(E1,5)
      H=(QEU-QEL)/FLOAT(2*MT)
      I=1
   21 EA=QEU-FLOAT(2*I-1)*H
      EB=QEU-FLOAT(2*I)*H
      GUDA=(1.-(E1+TNSE(EA))/EA)/GAMMA
      GUDB=(1.-(E1+TNSE(EB))/EB)/GAMMA
      IF(I.EQ.MT) GO TO 20
      SUM=SUM+4.*SF(CE*EA*SQRT(GUDA))/EA/EA/GUDA**1.5*HEIT(EA)+2.*SF(CE*
     1EB*SQRT(GUDB))/EB/EB/GUDB**1.5*HEIT(EB)
      I=I+1
      GO TO 21
   20 SUMB=SF(CE*EB*SQRT(GUDB))/EB/EB/GUDB**1.5*HEIT(EB)
      SEKIBN=H/3.*R*(SUM+4.*SF(CE*EA*SQRT(GUDA))/EA/EA/GUDA**1.5*
     1HEIT(EA)+SUMB)+SEKIBN
      IF(GUMAX.LE.GUZ(5)) RETURN
      SUM=SUMB
      QEU=QEL
      GO TO 35
   19 IF(GUMIN.GT.GUZ(6)) GO TO 30
      QEU=EU
   35 QEL=EL
      IF(GUMAX.GT.GUZ(6)) QEL=EZ(E1,6)
      H=(QEU-QEL)/24.
      I=1
   32 EA=QEU-FLOAT(2*I-1)*H
      EB=QEU-FLOAT(2*I)*H
      GUDA=(1.-(E1+TNSE(EA))/EA)/GAMMA
      GUDB=(1.-(E1+TNSE(EB))/EB)/GAMMA
      IF(I.EQ.12) GO TO 31
      SUM=SUM+4.*SF(CE*EA*SQRT(GUDA))/EA/EA/GUDA**1.5*HEIT(EA)+2.*SF(CE*
     1EB*SQRT(GUDB))/EB/EB/GUDB**1.5*HEIT(EB)
      I=I+1
      GO TO 32
   31 SUMB=SF(CE*EB*SQRT(GUDB))/EB/EB/GUDB**1.5*HEIT(EB)
      SEKIBN=H/3.*R*(SUM+4.*SF(CE*EA*SQRT(GUDA))/EA/EA/GUDA**1.5*
     1HEIT(EA)+SUMB)+SEKIBN
      IF(GUMAX.LE.GUZ(6)) RETURN
      SUM=SUMB
      QEU=QEL
      GO TO 22
   30 QEU=EU
   22 H=(QEU-EL)/12.
      I=1
   24 EA=QEU-FLOAT(2*I-1)*H
```

```
      GUDA=(1.-(E1+TNSE(EA))/EA)/GAMMA
      IF(I.EQ.6) GO TO 23
      EB=Q2U-FLOAT(2*I)*H
      GUDB=(1.-(E1+TNSE(EB))/EB)/GAMMA
      SUM=SUM+4.*SF(CE*EA*SQRT(GUDA))/EA/EA/GUDA**1.5*HEIT(EA)+2.*SF(CE*
     1EB*SQRT(GUDB))/EB/EB/GUDB**1.5*HEIT(EB)
      I=I+1
      GO TO 24
   23 SEKIBN=H/3.*R*(SUM+4.*SF(CE*EA*SQRT(GUDA))/EA/EA/GUDA**1.5*
     1HEIT(EA)+SF(CE*EL*SQRT(GUMAXD))/EL/EL/GUMAXD**1.5*HEIT(EL))+SEKIBN
      RETURN
      END
```

```
      FUNCTION EZ(E,M)
      COMMON X(800),EUELX(60),EUX(60),ELX(60),GUZ(6),AEZ(6,60),TE0,AS1,
     1US1,CJ,CK,CE,CR,CL,GAMMA,UU,IIA,IIB,IIC,EEA,EEB,EEC,SN0,SQI,TNSK,
     2D1,D2,D3,R,C1,EC1,KC1,CZ,EMAX,EMIN,KMAX,KMIN,YMAX,YMIN,EMAX0,EMIN0
      COMMON GUX(60,2),TNSX(60),P(14),Q(14),XX(15),EDX(60)
      I=2
      IF(E.GT.AEZ(M,12)) I=13
      IF(E.GT.AEZ(M,24)) I=25
      IF(E.GT.AEZ(M,36)) I=37
      IF(E.GT.AEZ(M,48)) I=49
      DO 2 J=I,60
      IF(E.LT.AEZ(M,J)) GO TO 3
    2 CONTINUE
    3 EZ=EUELX(J-1)+(EUELX(J)-EUELX(J-1))*(E-AEZ(M,J-1))/(AEZ(M,J)-
     1AEZ(M,J-1))
      RETURN
      END
```

```
      SUBROUTINE EUEL(E,EU,EL)
      COMMON X(800),EUELX(60),EUX(60),ELX(60),GUZ(6),AEZ(6,60),TE0,AS1,
     1US1,CJ,CK,CE,CR,U,GAMMA,UU,IIA,IIB,IIC,EEA,EEB,EEC,SN0,SQI,TNSK,
     2D1,D2,D3,R,C1,EC1,KC1,J7,EMAX,EMIN,KMAX,KMIN,YMAX,YMIN,EMAX0,EMIN0
      COMMON GUX(60,2),TNSX(60),P(14),Q(14),XX(15),EDX(60)
      IF(E.GE.CJ) GO TO 1
      I=2
      IF(E.GT.EUX(12)) I=13
      IF(E.GT.EUX(24)) I=25
      IF(E.GT.EUX(36)) I=37
      IF(E.GT.EUX(48)) I=49
      DO 2 J=I,60
      IF(E.LT.EUX(J)) GO TO 3
    2 CONTINUE
    3 EU=EUELX(J-1)+(EUELX(J)-EUELX(J-1))*(E-EUX(J-1))/(EUX(J)-EUX(J-1))
      GO TO 4
    1 EU=EMAX
    4 IF(E.LE.CK) GO TO 5
      I=2
      IF(E.GT.ELX(12)) I=13
      IF(E.GT.ELX(24)) I=25
      IF(E.GT.ELX(36)) I=37
      IF(E.GT.ELX(48)) I=49
      DO 6 J=I,60
      IF(E.LT.ELX(J)) GO TO 7
    6 CONTINUE
    7 EL=EUELX(J-1)+(EUELX(J)-EUELX(J-1))*(E-ELX(J-1))/(ELX(J)-ELX(J-1))
      GO TO 8
    5 EL=EMIN
    8 RETURN
      END
```

```
      FUNCTION HEIT(E)
      COMMON X(800),EUELX(60),EUX(60),ELX(60),GUZ(6),AEZ(6,60),TE0,AS1,
     1US1,CJ,CK,CE,CR,U,GAMMA,UU,IIA,IIB,IIC,EEA,EEB,EEC,SN0,SQI,TNSK,
     2D1,D2,D3,R,C1,EC1,KC1,JZ,EMAX,EMIN,KMAX,KMIN,YMAX,YMIN,EMAX0,EMIN0
      COMMON GUX(60,2),TNSX(60),P(14),Q(14),XX(15),EDX(60)
      IF(E.GT.EEC) GO TO 1
      K=IIB+IFIX((EEC-E)/D3)
      EK=EEC-D3*FLOAT(K-IIB)
      HEIT=X(K)-(X(K)-X(K+1))*(EK-E)/D3
      RETURN
    1 IF(E.GT.EEB) GO TO 2
      K=IIA+IFIX((EEB-E)/D2)
      EK=EEB-D2*FLOAT(K-IIA)
      HEIT=X(K)-(X(K)-X(K+1))*(EK-E)/D2
      RETURN
    2 K=IFIX((EEA-E)/D1)
      IF(K.LE.KMAX) GO TO 3
      EK=EEA-D1*FLOAT(K)
      HEIT=X(K)-(X(K)-X(K+1))*(EK-E)/D1
      RETURN
    3 HEIT=YMAX-(YMAX-X(KMAX))*(EMAX-E)/(EMAX-EMAX0)
      RETURN
      END
```

```
      FUNCTION GUA(E)
      COMMON X(800),EUELX(60),EUX(60),ELX(60),GUZ(6),AEZ(6,60),TE0,AS1,
     1US1,CJ,CK,CE,CR,C,GAMMA,UU,IIA,IIB,IIC,EEA,EEB,EEC,SN0,SQI,TNSK,
     2D1,D2,D3,R,C1,EC1,KC1,C7,EMAX,EMIN,KMAX,KMIN,YMAX,YMIN,EMAX0,EMIN0
      COMMON GUX(60,2),TNSX(60),P(14),Q(14),XX(15),EDX(60)
      I=2
      IF(E.GT.EUELX(12)) I=13
      IF(E.GT.EUELX(24)) I=25
      IF(E.GT.EUELX(36)) I=37
      IF(E.GT.EUELX(48)) I=49
      DO 1 J=I,60
      IF(E.LT.EUELX(J)) GO TO 2
    1 CONTINUE
    2 GUA=GUX(J-1,1)+(GUX(J,1)-GUX(J-1,1))*(E-EUELX(J-1))/(EUELX(J)-
     1EUELX(J-1))
      RETURN
      END
```

```
      FUNCTION TNSE(E)
      COMMON X(800),EUELX(60),EUX(60),ELX(60),GUZ(6),AEZ(6,60),TE0,AS1,
     1US1,CJ,CK,CE,CR,U,GAMMA,UU,IIA,IIB,IIC,EEA,EEB,EEC,SN0,SQI,TNSK,
     2D1,D2,D3,R,C1,EC1,KC1,UZ,EMAX,EMIN,KMAX,KMIN,YMAX,YMIN,EMAX0,EMIN0
      COMMON GUX(60,2),TNSX(60),P(14),Q(14),XX(15),EDX(60)
      I=2
      IF(E.GT.EUELX(12)) I=13
      IF(E.GT.EUELX(24)) I=25
      IF(E.GT.EUELX(36)) I=37
      IF(E.GT.EUELX(48)) I=49
      DO 1 J=I,60
      IF(E.LT.EUELX(J)) GO TO 2
    1 CONTINUE
    2 TNS=TNSX(J-1)+(TNSX(J)-TNSX(J-1))*(E-EUELX(J-1))/(EUELX(J)-
     1EUELX(J-1))
      EDA=EDX(J-1)+(EDX(J)-EDX(J-1))*(E-EUELX(J-1))/(EUELX(J)-EUELX(J-1
     1))
      TNSE=TNS+TE0*SQRT(EDA)
      RETURN
      END
```

```
      SUBROUTINE SUBAS1
      COMMON X(800),EUELX(60),EUX(60),ELX(60),GUZ(6),AEZ(6,60),TE0,AS1,
     1US1,CJ,CK,CE,CR,U,GAMMA,UU,IIA,IIB,IIC,EEA,EEB,EEC,SN0,SQI,TNSK,
     2D1,D2,D3,R,C1,EC1,KC1,JZ,EMAX,EMIN,KMAX,KMIN,YMAX,YMIN,EMAX0,EMIN0
      COMMON GUX(60,2),TNSX(60),P(14),Q(14),XX(15),EDX(60)
      DIMENSION Z(50)
      DD=0.05
      IF(JZ.EQ.2) GO TO 1
      A1=C1
      GO TO 2
    1 A1=EMIN
    2 C3=UU*A1-TNSE(A1)
      KC3=IFIX(-C3/DD)+1
      EC3=DD*(1.-FLOAT(KC3))
      DO 12 I=1,KC3
      E=DD*(1.-FLOAT(I))
      CALL EUEL(E,EU,EL)
   12 Z(I)=SKIBN(E,EU,A1)
      SUM=0.0
      DO 13 I=1,KC3
   13 SUM=SUM+Z(I)
      AS1=(SUM-Z(1)/2.-Z(KC3)/2.)*DD+Z(KC3)*(EC3-C3)/2.
      RETURN
      END
```

```
      SUBROUTINE SUBUS1
      COMMON X(800),EUELX(60),EUX(60),ELX(60),GUZ(6),AEZ(6,60),TE0,AS1,
     1US1,CJ,CK,CE,CR,U,GAMMA,UU,IIA,IIB,IIC,EEA,EEB,EEC,SN0,SQI,TNSK,
     2D1,D2,D3,R,C1,EC1,KC1,JZ,EMAX,EMIN,KMAX,KMIN,YMAX,YMIN,EMAX0,EMIN0
      COMMON GUX(60,2),TNSX(60),P(14),Q(14),XX(15),EDX(60)
      XC1=X(KC1)+(X(KC1-1)-X(KC1))*(C1-EC1)/D3
      IF(JZ.EQ.3) GO TO 1
      S=(XC1+X(KC1))*(C1-EC1)/2.
      SUM=0.0
      DO 2 I=KC1,IIC
    2 SUM=SUM+X(I)
      US1=S+(SUM-X(KC1)/2.-X(IIC)/2.)*D3
      GO TO 3
    1 IF(EMIN.GT.EC1) GO TO 4
      S=(XC1+X(KC1))*(C1-EC1)/2.+(YMIN+X(KMIN))*(EMIN0-EMIN)/2.
      SUM=0.0
      DO 5 I=KC1,KMIN
    5 SUM=SUM+X(I)
      US1=S+(SUM-X(KC1)/2.-X(KMIN)/2.)*D3
      GO TO 3
    4 US1=(XC1+YMIN)*(C1-EMIN)/2.
    3 RETURN
      END
```

```
      FUNCTION SF(EPS)
      COMMON X(800),EUELX(60),EUX(60),ELX(60),GUZ(6),AEZ(6,60),TE0,AS1,
     1US1,CJ,CK,CE,CR,C,GAMMA,UU,IIA,IIB,IIC,EEA,EEB,EEC,SN0,SQI,TNSK,
     2D1,D2,D3,R,C1,EC1,KC1,JZ,EMAX,EMIN,KMAX,KMIN,YMAX,YMIN,EMAX0,EMIN0
      COMMON GUX(60,2),TNSX(60),P(14),Q(14),XX(15),EDX(60)
      IF(EPS.LE.XX(1)) GO TO 705
      DO 703 J=2,14
      IF(EPS.LT.XX(J)) GO TO 714
  703 CONTINUE
  705 SF=1.46*EPS**(0.35)
      RETURN
  714 SF=P(J-1)*ALOG(EPS)+Q(J-1)
      RETURN
      END
```

付録－C　Heイオンの後方散乱法における測定方法に起因した散乱数の増加に関する検討

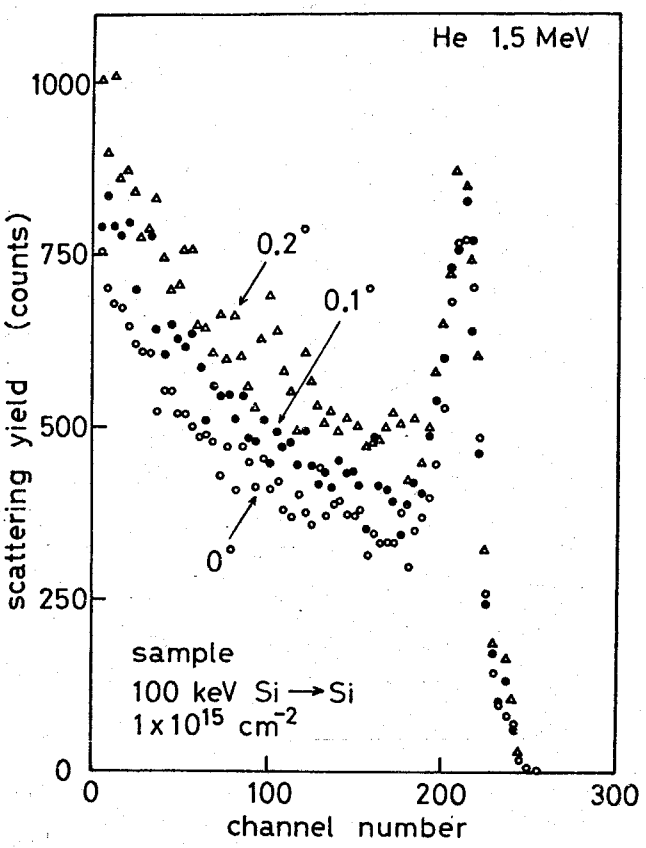
測定方法に起因して低エネルギー側の散乱数が増加する原因としては，まず，Heイオンの入射方向が，結晶軸に完全に一致していない場合が考えられる。

この不一致に起因する後方散乱数の増加を調べるため、入射イオンと結晶軸とが平行な場合，0.1°ずれている場合，および0.2°ずれている場合の後方散乱スペクトルを示したのが図 C－1 である。同図より，図 8－8 の 800°C アニールの試料と，600°C アニールの試料との散乱数の差は、約0.1°のビームと，結晶軸とのずれに対応することがわかる。

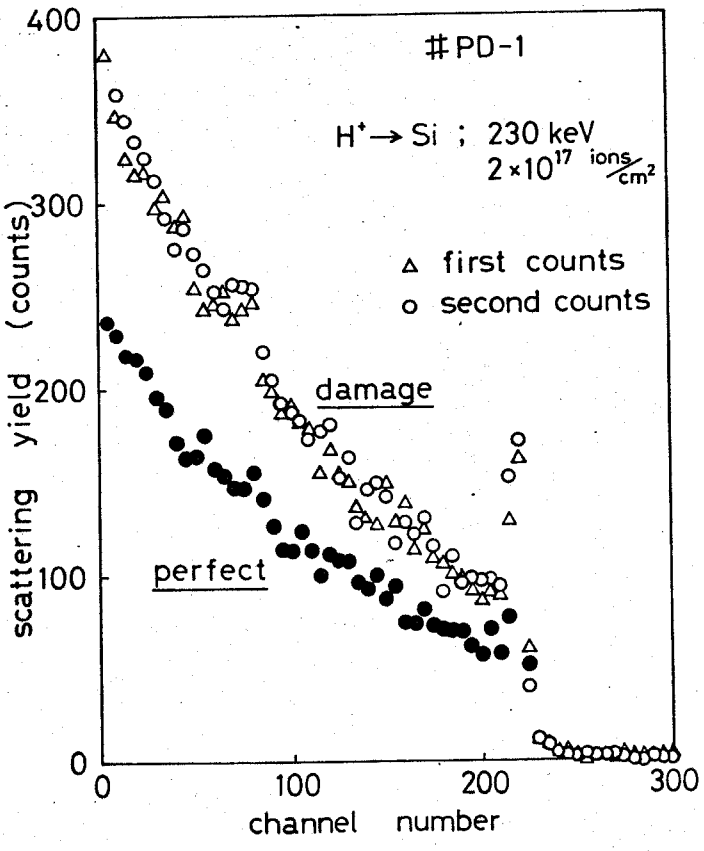
しかしながら、本実験における結晶軸合わせは、図 7－3（b）に示す方法で行ない、結晶軸の近くでは、一定の電荷量に対してシングルチャンネル波高分析器を用いて、0.05°おきに後方散乱されるイオン数を測定して、内挿点から軸を求めているから、チャンネル軸からのずれは、0.05°以下と考えることができる。したがって、後方散乱数の増加は、ビームと結晶軸とのずれでは説明することができない。

つぎに、測定方法に起因するもう2つの原因として、測定ビームによって、新たな格子欠陥ができ、このために後方散乱数が増加することが考えられる。5μQの電荷により、どの程度の格子欠陥ができるかを測定したのが図C－2である。同図は、図 8－8 の試料とほぼ等量の欠陥が存在する試料の後方散乱スペクトルを、同一点にビームを当てながら、5μQづつ、2回測定したものである。同図より、測定ビームによる格子欠陥の増加は、顕著ではなく、すべての試料について同一条件で測定した図 8－8 の結果の相対値には、格子欠陥の影響は含まれていないと結論できる。

以上述べたように、800°Cアニール試料の低エネルギー側の後方散乱数の増加は、測定方法に基づく原因では説明することができず、したがって、このような物理現象が実際に起っていると考えることができる。



図C-1
Heイオンの入射方向と結晶軸方向とがずれている場合の，後方散乱スペクトルの変化。



図C-2
測定ビームの作る格子欠陥に起因した後方散乱スペクトルの変化。第1回目の測定(△)と第2回目の測定(○)において，後方散乱数の変化は，ほとんど認められない。