

1-1 イオン注入によって発生する格子欠陥分布の理論的考察

東京工大・工学部

古川 静二郎  
石原 宏

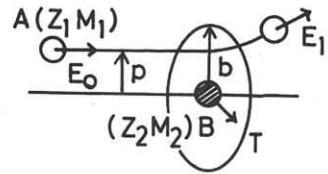
**まえがき** イオン注入によって発生する格子欠陥分布を知ることは、デバイスの性能に対する欠陥それ自身の影響、あるいは不純物の捕獲拡散への欠陥の影響などを考察する際、大変重要と考えられる。われわれは、入射イオンおよび格子点を外れた基板原子のエネルギー分布より格子欠陥分布を解析的な方法で求め、Siに対する $S_b(50\text{ keV})$ の場合について、Amorphousの限界注入量が $10^{14}$ 個/cm<sup>2</sup>、欠陥最大密度が不純物最大密度までの距離の約2/3の所に生じる等の結論を得たので報告する。

**イオンと基板原子との衝突時におけるエネルギーの関係** 質量 $M_1$ 、原子番号 $Z_1$ の原子Aが、エネルギー $E_0$ 、衝突径数 $P$ で、 $M_2$ 、 $Z_2$ の原子Bと衝突する場合を考える。Aは入射イオンあるいは格子点より外れた基板原子に相当する。文献(1)と同様な手法で、相互作用ポテンシャルとして式(1)を仮定すると<sup>2)</sup> $P$ と、衝突後のAのエネルギー $E_1$ 、およびBの得るエネルギー $T (=E_0 - E_1)$ との間には、次式が成り立つ。

$$V(r) = \frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2 \cdot a}{4\pi \epsilon_0 \cdot e \cdot 0.8853 \cdot r^2} \quad \text{----- (1)}$$

$$\xi = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \cos \frac{\pi}{\sqrt{1 + a^2 / (C_E^2 \cdot E_0 \cdot P^2)}} \right\} \quad \text{----- (2)}$$

$$\xi = \frac{(M_1 + M_2)^2 \cdot \left\{ E_1 - \frac{(M_1 - M_2)^2}{(M_1 + M_2)} \right\}}{4 \cdot M_1 \cdot M_2 \cdot E_0} = 1 - \frac{T}{T_m} \quad \text{----- (3)}$$



ここで、 $e$  = 単位電荷、 $e = 2.7183$ 、 $\epsilon_0$  = 真空の誘電率 (図-1)原子Aと基板原子Bとの衝突。

$a = 0.8853 a_0 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}$ 、 $a_0$  = Bohr半径、 $T_m = 4 M_1 M_2 E_0 / (M_1 + M_2)^2$ 、 $C_E = 0.8853 \cdot e \cdot C_E$ 、 $C_E = 4\pi \epsilon_0 a \cdot M_2 / Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2 (M_1 + M_2)$  である。

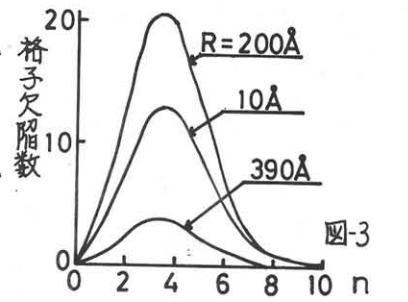
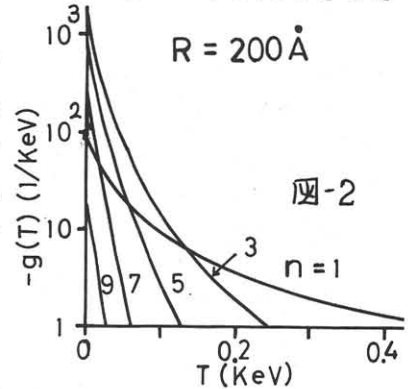
基板原子が格子点から外れるのに必要なエネルギーを $T_d$ とする。 $T > T_d$ を満たす有効衝突断面積 $\sigma_d$ は、式(3)で $T = T_d$ とおき、式(2)に代入することにより $E_0$ のみで衝突径数 $P$ が表わされるから、 $\sigma_d = \pi \cdot P^2$ と簡単に求まる。したがって、Bの等価最近接原子間隔<sup>1)</sup>を $b$ とすると、一回の衝突により格子点を外れた基板原子の発生率は $\sigma_d(E_0) / \pi \cdot b^2$ で与えられる。また、そのエネルギー分布は、衝突径数が $P$ と $P+dP$ にある確率 $2\pi P dP / \pi \cdot b^2$ を $T$ で表現することにより求まる。式(2)(3)を用いて、結局エネルギー分布は次式で与えられる。

$$g(T) \cdot dT = - \frac{2\pi^2 a^2}{E_0 \cdot C_E^2 \cdot b^2} \cdot \frac{dT}{\sqrt{T(T_m - T)}} \cdot \frac{\cos^{-1}(2T/T_m - 1)}{[\pi^2 - \{\cos^{-1}(2T/T_m - 1)\}^2]} \quad \text{----- (4)}$$

ここで、 $\int_{T_d}^{T_m} g(T) dT = \sigma_d / \pi b^2$ となる。式(4)は原子Aのエネルギー分布がパルス状、すなわち、最初 $n$ 注入時の場合である。一般にAのエネルギー分布が $f(E)$ で与えられる場合は、 $\sigma_d(E) / \pi b^2$ および、式(4)と $f(E)$ との積を $E$ に関して積分することにより、全体の格子欠陥の発生率、および、格子点を外れた原子のエネルギー分布が求まる。一方、原子Aに着目して、衝突後のAのエネルギー分布を求める場合、充分大きな衝突径数に対しても、AとBとの相互作用が存在し、計算が困難になる。

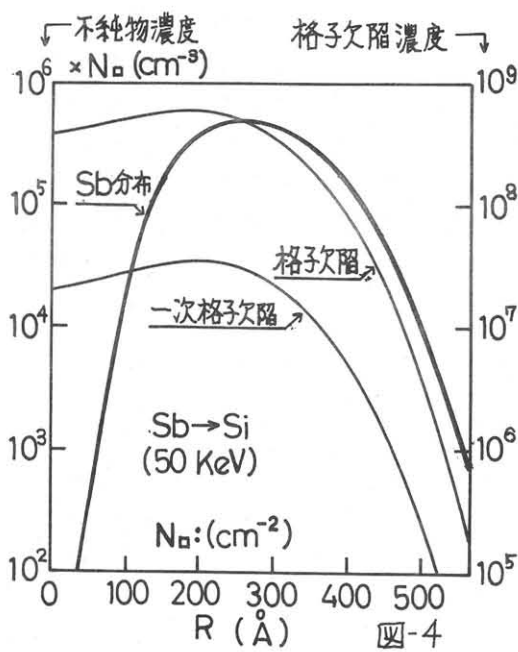
そこで、 $P \leq b$ について式(2)(3)を用いて、エネルギー分布の絶対値を計算し、 $P > b$ の衝突によるエネルギー損失はLundhard等が行ったのと同様な方法で平均化し<sup>2)</sup>、 $P \leq b$ の場合に求まるエネルギー分布を補正した。

**モデルと解析結果** Si基板に50 KeVで加速されたSbイオンを注入する場合を考える。先の解析<sup>1)</sup>の場合と同じように、計算時間の短縮のため、5原子層ごとに分布を求める事にする。また、 $T_d = 25\text{eV}$ とし、はじき出されたSi原子のエネルギーは、与えられたエネルギー $T$ より $T_d$ だけ一様に減少していると考ええる。以上の様な、モデルと仮定で、B原子に与えられるエネルギー $T$ と、その分布の確率を、多重衝突次数 $n$ をパラメータにして示したのが図-2である。次数が上るにつれ、与えられるエネルギーは急激に低い方に移るのが示されている。また、1個の注入イオンがある深さ $R$ で何個の欠陥数を発生するのかを示したのが図3である。同図で $n=1$ はSbイオンによる直接の、 $n \geq 2$ は、はじき出されたSi原子による間接の作用を意味する。この図から、 $n=8$ ぐらいまで考慮すれば良い事が分る。この方法で求めたSbイオンの不純物分布および格子欠陥分布(図3の積分値)を図4に示す。縦軸は $\times N_0$ (個/cm<sup>3</sup>)で示してある。



**結果の検討**

図4からの格子欠陥密度が最大となる深さは、不純物分布が最大となる深さの約2/3である。②欠陥密度が基板原子密度と等しくなる状態をAmorphous



の状態ときえ、イオン打込数を求めると $N_0 = 8.7 \times 10^{13}$  個/cm<sup>2</sup> となり、Sb(40 keV)  $\rightarrow$  Siの場合に実験的に得られた $10^{14}$ 個/cm<sup>2</sup>に良く一致する<sup>3)4)</sup>。③1個のSbイオンは直接100個程度の欠陥しか作らないか、全体では1700個の欠陥を作る、と言える。

**あとがき** 入射イオンおよび格子点を外れた基板原子のエネルギー分布に基づいて基板中の格子欠陥分布を求めた。本方法は、物理現象の把握が容易という意味で、モンテカルロ法<sup>5)6)</sup>よりもすぐれている面をもつと考える。なお、現在理論検証のための実験準備中である。

1) 古川,石原: 理研シンポジウム 1970, No.1-4  
 2) Lundhard et al: Dan. Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd., 33, 14, P1  
 3) J.A. Davies et al: Can. J. Phys., 45, P4053  
 4) 徳山 他: 第16回放射線物性学会(1969) 31p-GE-13  
 5) D.K. Braice: Appl. Phys. Letters 16, 3, P103  
 6) M. Yoshida: J. Phys. Soc. Japan 16, 1, P44