

## コンピュータグラフィックスによる超拡散原子の連続的な表示モデル(アニメーション)

### — (1) 表面拡散 —

Continuous Display Models (Animation) of Superdiffusion Atoms in Semiconductors by Computer Graphics

### — (1) surface diffusion —

長尾 浩道 \*

和田 隆夫

NAGAO Hiromichi

and

WADA Takao

#### Summary

Electron beam dopings are impurity doping processes that impurity sheets are overlaid on the substrate and these surfaces are irradiated by electron beam. In this experiment, an overlayer of Ge sheet was placed on a Si substrate, and the overlayer was irradiated partially by an electron beam of 7 MeV. It was observed by a secondary ion mass spectrometry (SIMS) that displaced atoms in the impurity sheet migrated to its surface and diffused to the unirradiated region. We continued the discussion of further study of the surface diffusion. The animation of a continuous display superdiffusion model by computer graphics was collectively presented by several continuous elemental processes of superdiffusion atoms in semiconductors.

キーワード：表面拡散、表面の活性化障壁、キックアウト機構、不純物シート、アニメーション、コンピュータグラフィックス

**Keywords:** surface diffusion activation energy of surface kick-out mechanism

Impurity sheet animation computer graphics

#### 1. はじめに

電子ビームドーピングとは(Electron Beam Doping:EBD)<sup>1)</sup>、半導体基板上に導入したい不純物シートを載せる、あるいは蒸着によって不純物層を形成させて、その上から高エネルギーの電子線を照射して基板内に不純物をドーピングさせる方法である。この方法は、1980年に著者の一人和田によって発見された。電子ビームドーピングは、質量の小さな電子を用いるため、照射によって生成される欠陥は、Frenkel-pair等の単純な点欠陥程度であり、さらに低温度のアニーリングで済むという利点がある。また、電子線のエネルギーは容易に制御できるため、不純物を基板のごく浅い所から深部に至るまで任意にドーピングでき、より微細な加工が可能である。さらに室温でのドーピングが可能であり<sup>2)</sup>、照射に使う線源も安定で安価である。電子線を不純物シートに照射したときに、電子のもつエネルギーが250 KeV以上あれば、格子位置にある不純物原子に衝

突すると、不純物原子が2体衝突的に電子のエネルギーを受け取って格子位置からはじき出される。このはじき出された原子は1次はじき出し原子(Primary knock-on atom:PKA)と呼ばれる。7MeVの電子線を照射した場合の1次はじき出し原子のエネルギーは表面に近い所で110 eV、深い所で0 eVである<sup>3)</sup>。はじき出された原子は、そのエネルギーが、25eV以上あれば、次の原子をはじき出しGeの場合、1個の電子で最高7個の原子をはじき出す。また、はじき出された原子は0から0.2 eVのエネルギーがあれば格子間を移動できる。そして、はじき出された原子のうち約90%は空孔と再結合し、残りの約10%が基板表面に到達する。表面に到達した原子は、殆ど、エネルギーは0である。本研究では、電子ビームドーピングによって生じる表面拡散の考察を行い、その過程についても研究されてきた。今回、超拡散の連続的な素過程をアニメーションによって動的に可視化することができた。

\* 名古屋産業大 研究生 (4月より名古屋大学大学院情報科学研究科複雑系科学専攻 博士前期課程進学)

2. アニメーションのモデル

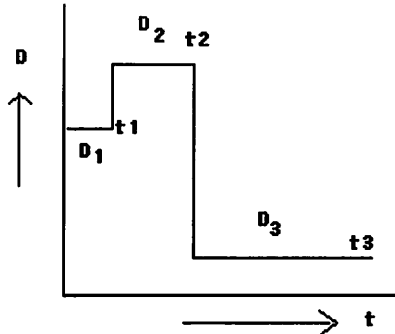


図1 はじき出し原子の拡散係数Dと電子衝突してからの時間との関係

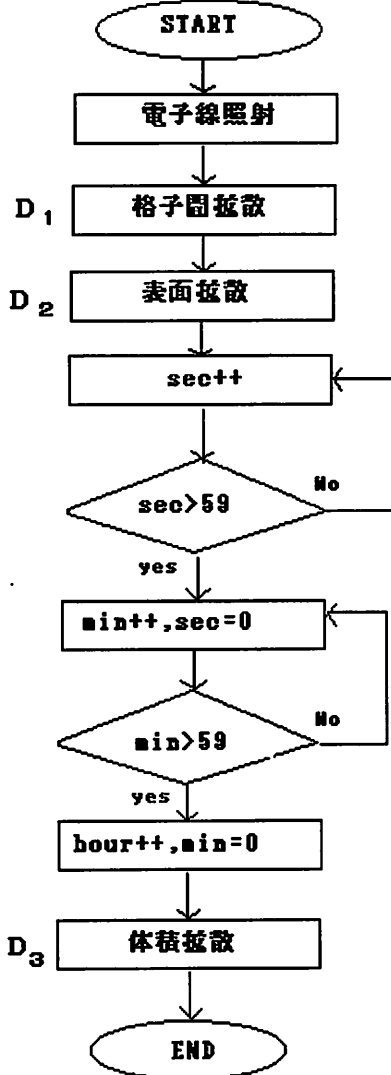


図2 メインループのフローチャート

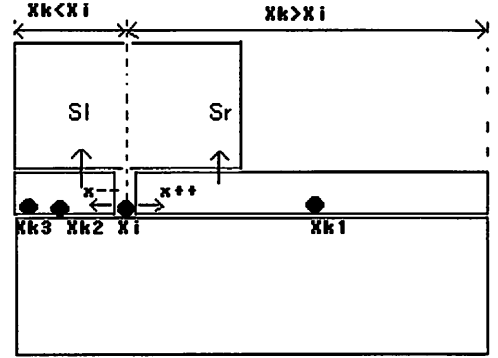
はじき出し原子の拡散係数Dと電子衝突してからの時間との関係を図1に、アニメーションのメインループのフローチャートを図2に示す。

2-1モデル化

(1) 乱数 (格子間原子)

電子線の照射によるはじき出される格子間原子と電子線と2体衝突する格子位置を乱数により設定した。

(2) 濃度勾配



ml, mr: 原子の個数  
Sl, Sr: 面積

図3 濃度勾配のしくみ

```

if(Xk<Xi) Ml++;           (i)
else if(Xk>Xi) Mr++;      (ii)

if(Nl>Nr) Xi++;           (iii)
else if(Nl<Nr) Xi--;      (iv)
    
```

$$Nl = Ml / Sl, Nr = Mr / Sr$$

実験の結果から判断すると、未照射領域には表面拡散により非常に早く原子が拡散される。図3で、Xiにある原子は右方向 (Xi++) の動きが左方向 (Xi--) の動きに比べて非常に大きい事が推論できる。これを実現するために、今仮に右方向の成分 (Xk) を 1/10にすると、

$$Nr = \frac{Mr}{Sr} = \frac{Mr}{Xk1 \cdot \frac{Xk2}{10}} \quad (1)$$

となる。まずNrの値が10倍にあり (iv)式からXi--が生じ易く左側の原子の濃度が高くなる。その結果、iii)式により濃度が小さい方即ちXi++の移動が起こり易くなる。この関係は、実験結果と見かけ上一致することになる。それでその仕組みをプログラムに導入して進める。

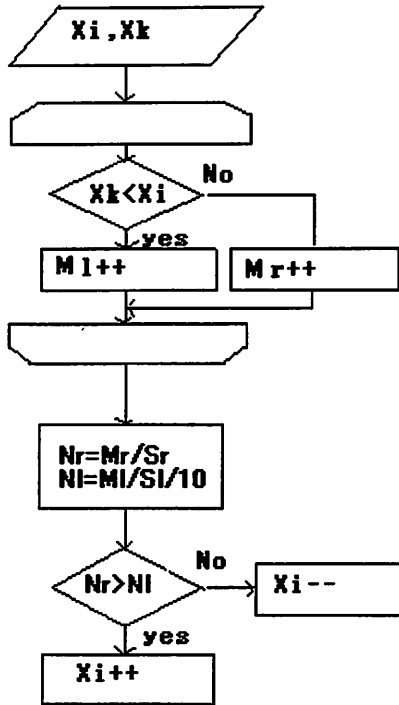


図4 表面拡散のフローチャート

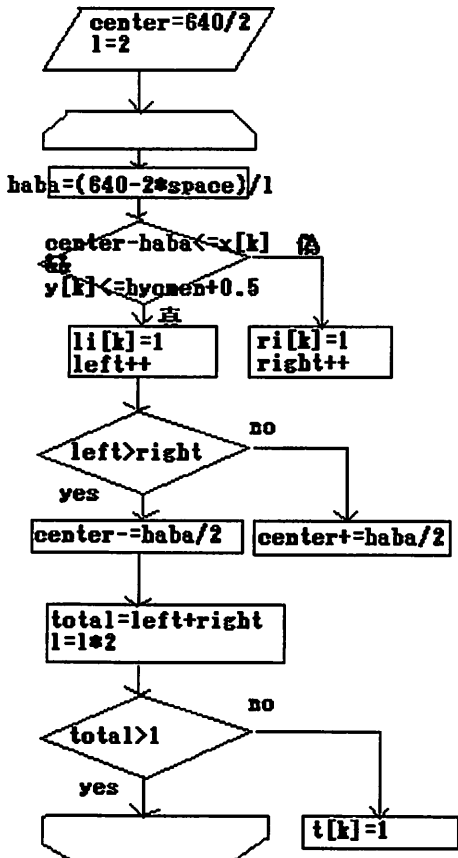


図5 体積拡散のフローチャート

表面拡散のフローチャートを図4に、体積拡散のフローチャートを図5に示す。

- (3) 乱数(体積拡散)  
体積拡散の基板内に拡散する深さを乱数により設定した。
- (4) 不純物シートの寸法、原子のサイズ  
不純物シート、基板、原子のサイズをモデル化し設定した。
- (5) 色の指定  
RGBによる不純物シート、基板、原子の色の指定をした。
- (6) 原子どうしの重なりを無くす計算  
原子どうしが衝突したときに画面上で重ならないように計算した。
- (7) プログラムの繰り返し処理  
アニメーションを動的に表すために繰り返し処理を行った。
- (8) 表面拡散、体積拡散の時間軸  
表面拡散、体積拡散の時間軸を原子のサイズと拡散係数により計算し画面上に表示した。
- (9) 原子の画面中でのちらつきがない計算  
原子と不純物シート、基板の重なりの中で画面のちらつきがないように処理した。
- (10) 表面拡散の原子の2層目の計算  
表面拡散の基板表面での拡散とは別に、原子の2層目の拡散は別の関数で処理した。
- (11) 素過程間の相互作用(1層目、2層目間の原子)  
1層目、2層目の原子間に濃度勾配による相互作用が存在する。
- (12) 試料名の文字出力  
VisualC++による試料名の文字出力がある。
- (13) アニメーションの再生、停止、新たに再生  
アニメーションの表示の際、表示の再生、停止、新たに再生の機能を設定した。
- (14) 原子の個数  
電子線照射によりはじき出される原子の個数をあらかじめ設定した。

2-2 ソースコード

```

(1) 乱数 (格子間原子)
    for(i= 1;i<= n;i+ + )
    {
        x[i]= 17+ space+ (rand()% (INS));
        y[i]= 41+ 16+ rand()% (41+ 32);//+ rakka-73-32
    }
(2) 濃度勾配
    m l、m r : 原子の個数
    S l、S r : 面積
プログラム例
    if (Xk< Xi) ml+ + ;
else if (Xk> Xi) mr+ + ;
    nl= ml/Sl;
    nr= mr/Sr/10;
if(nl> nr) Xi+ + ;
else if(nl< nr) Xi--;
    Xk,Xi: 原子の座標
    nl,nr: 原子の濃度
(3) 乱数 (体積拡散)
for(k= 1;k< n;k+ + )
{
if (rand()% 2= = 1) ti[k]= hyomen+ 60+ rand()% 5;
else ti[k]= hyomen+ 100+ rand()% 5;
}
(4) 不純物シートの寸法、原子のサイズ
    space= 160,rakka= 184,hyomen= 200;
    CBrush
backgroundBrush0((COLORREF)
RGB(255,255,0));
,
    CBrush*
pOldBrush0= m_MemDC2.SelectObject(& background
Brush0);
    m_MemDC2.Rectangle(space,41+ 16,space+ 80,rak
ka-1-34);
    m_MemDC2.SelectObject(pOldBrush0);
    pOldBrush0-> DeleteObject();
    CBrush
backgroundBrush((COLORREF)
RGB(0,255,255));
    CBrush*
OldBrush= m_MemDC2.SelectObject(& backgroundBrush);
    m_MemDC2.Rectangle(space,hyomen+ 18,639,399
-35);
    m_MemDC2.SelectObject(pOldBrush);
    pOldBrush-> DeleteObject();

(5) 色の指定
//不純物シートの色設定
    CBrush
backgroundBrush0((COLORREF)
RGB(255,255,0));
,
    CBrush*
pOldBrush0= m_MemDC2.SelectObject(& backgroundBrush0
CBrush*
pOldBrush0= m_MemDC2.SelectObject(& backgroundBrush0
);

```

```

pOldBrush0= m_MemDC2.SelectObject(& backgroundBrush0
);
    m_MemDC2.Rectangle(space,41+ 16,space+ 80,rakka-
1-34);
    m_MemDC2.SelectObject(pOldBrush0);
    pOldBrush0-> DeleteObject();
//基板の色設定
    CBrush backgroundBrush((COLORREF)
RGB(0,255,255));
    CBrush*
OldBrush= m_MemDC2.SelectObject(& backgroundBrush);
m_MemDC2.Rectangle(space,hyomen+ 18,639
,399-35);
//原子の色設定
    m_MemDC2.SelectObject(pOldBrush);
    pOldBrush-> DeleteObject();
    CPen ppp;
    ppp.CreatePen(BS_SOLID ,1,RGB(255,255,255));
    m_MemDC3.SelectObject(ppp);
    CBrush
backgroundBrush2((COLORREF)RGB(255,255,0));
    CBrush*
pOldBrush2= m_MemDC3.SelectObject(& backgroundBrush2
);
    m_MemDC3.Ellipse(1,1,15,15);
    m_MemDC3.SelectObject(pOldBrush2);
    pOldBrush2-> DeleteObject();

(6) 原子どうしの重なりを無くす計算
for(k= 1;k< m-1;k+ + )
{
    if(x[k]< x[i] && y[i]< hyomen+ 1) left+ + ;
        else if(x[k]> x[i]&& y[i]< hyomen+ 1)
            right+ + ;
    r= hypot(abs(x[k]-x[i]),abs(y[k]-y[i]));
        if(r> 0.0 && r< 17 &&
y[k]<= hyomen+ 1 && x[k]< x[i]) stopl= 1;
        if(r> 0.0 && r< 17 &&
y[k]<= hyomen+ 1 && x[k]> x[i]) stopr= 1;
}

(7) プログラムの繰り返し処理
# define ID_MAIN 500

BOOL CM y2dmodelApp::OnIdle(LONG lCount)
{
    if(flgl)
    PostMessage(theApp.m_Handle,WM_COMMAND,ID_M
AIN,NULL);
    if(flgr)
    PostMessage(theApp.m_Handle,WM_COMMAND,ID_M
AIN,NULL);
    return CWinApp::OnIdle(lCount);
}

```

(8) 表面拡散、体積拡散の時間軸

```
//表面拡散の時間軸
void CMy2dmodelView::timer()
{
    sec++;
    if(sec>59) {
        min++;
        sec=0;
        if(min>59) {hour++;
                    min=0;}
    }
    char Buf[256];
    sprintf(Buf,"%02d:%02d:%02d x 1/15000 surface
diffusion | volume diffusion (10
times)%02d:%02d:%02d
x 1/0.000015",hour,min,sec,thour,tmin,tsec);
    m_MemDC4.SetBkColor(RGB(0,0,0));
    m_MemDC4.SetTextColor(RGB(255,255,255));
    m_MemDC4.TextOut(10,10,Buf,18+20+52);
}
```

(9) 画面中でのちらつきがない計算

```
for(i=1;i<m;i++){
    m_MemDC.BitBlt(0,0,16,16,&m_MemDC2,x[i],y[i],SR
CCOPY );
    m_MemDC.BitBlt(0,0,16,16,&m_MemDC3,0,0,SR
INVERT );
    m_MemDC4.BitBlt(x[i],y[i],16,16,&m_MemDC,0,0,
SRCCOPY);
}
pDC-
>BitBlt(0,0,640,1000,&m_MemDC4,0,0,SRCCOPY);
```

(10) 表面の原子の2層目の計算

```
void CMy2dmodelView::t_epta()
{
    ep[i]=0;
    l=i-1;
    for(p=1;p<m;p++)
    {
        r=hypot(abs(x[p]-x[i]),abs(y[p]-y[i]));
        if(r>0.0 && r<17 && y[i]<y[p]-6) ep[i]+=1;
        else ep[i]=0;
    }
    if (ep[i]<1) { return; }
    ep[i]=1;
    left=0,right=0;
    stopl=0,stopr=0;
    n_left=0,n_right=0;
    for(k=1;k<m;k++)
    {
        if(x[k]<x[i] && y[k]<hyomen+1 )
        left++;
        else if(x[k]>x[i] && y[k]<hyomen+1 ) right++;
        r=hypot(abs(x[k]-x[i]),abs(y[k]-y[i]));r>0 &&
r<17 && y[i]<y[k]+15 && y[i]>y[k]-15 && x[k]<x[i])
stopl=1;if(r>0 && r<17 && y[i]<y[k]+15 &&
y[i]>y[k]-15 && x[k]>x[i]) stopr=1;
    }
}
```

```
n_left=(left*1000)/(x[i]-space+7+1);//-
spacen_right=(right*1000)/(((623-
(x[i]+1)));//space+if (n_left>n_right &&
x[i]<623 && stopr!=1) {x[i]+=1;
}
else if
(n_left<n_right && x[i]>space &&
stopl!=1){ x[i]--;
}
y[i]-=0.5;static int eee=0;
for(k=1;k<m;k++){
    {r=hypot(abs(x[k]-x[i]),abs(y[k]-y[i])); if(r>0
&& r<17 && y[i]<y[k]-6) { y[i]-
=0.5; eee+=1;} eee=0;
}
```

(11) 素過程間の相互作用(1層目、2層目間の原子)

```
for(k=1;k<m;k++){
    if(x[k]<x[i] &&
y[k]<hyomen+1 ) left++;else if(x[k]>x[i] &&
y[k]<hyomen+1 ) right++;
}
```

(12) 試料名の文字出力

```
m_MemDC4.TextOut(space-45,30," e -
↓ ↓ ↓",16);
m_MemDC4.TextOut(40,100,"impurity
sheet",14);
m_MemDC4.TextOut(490,200," free
atom",10);
m_MemDC4.TextOut(40,260,"substrate",9);
```

(13) アニメーションの再生、停止、新たに再生

```
//停止
void CMy2dmodelApp::OnStop()
{
    flg=FALSE;
}
//再生
void CMy2dmodelApp::OnPlay()
{
    flg=TRUE;
}
```

BOOL CMy2dmodelApp::OnIdle(LONG lCount)

```
{
    if(flg)
    PostMessage(theApp.m_Handle,WM_COMMAND,ID_
MAIN,NULL);
    return CWinApp::OnIdle(lCount);
}
```

(14) 原子の個数

```
n=256;
```

表面拡散をしている時の原子の流れに対する瞬時の1こ  
まの3例を映像で図6 a)、図6 b)、図6 c) に示す。

- (イ)  $t_1$  秒後の表面拡散の瞬時の1こまを抜粋したもの。
- (ロ)  $t_2$  秒後の表面拡散の瞬時の1こまを抜粋したもの。
- (ニ)

- (ハ)  $t_3$  秒後の表面拡散の瞬時の1こまを抜粋したもの。

基板左端から8mmまでGeシートを重ね合わせ、さらに基板左端から4mmまでを電子線で照射した。電子線の照射条件は電子エネルギーが7MeV、照射量が $1 \times 10^{18} \text{ e/cm}^2$ 、照射時間4000s、照射中温度40℃、気圧 $7.5 \times 10^{-8} \text{ Torr}$ である。

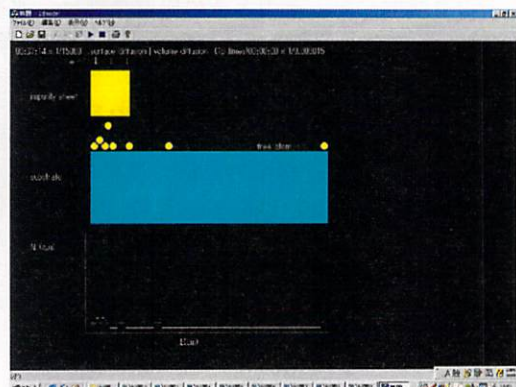


図6 a)  $t_1$  秒後の表面拡散 (イ)

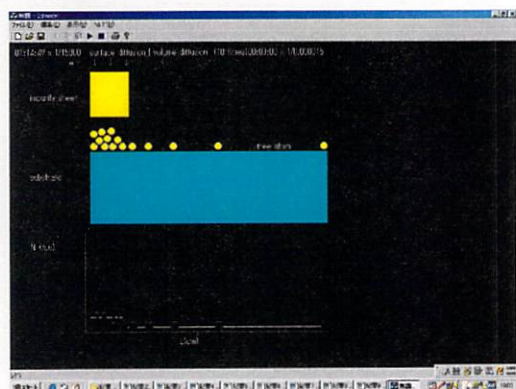


図6 b)  $t_2$  秒後の表面拡散 (ロ)

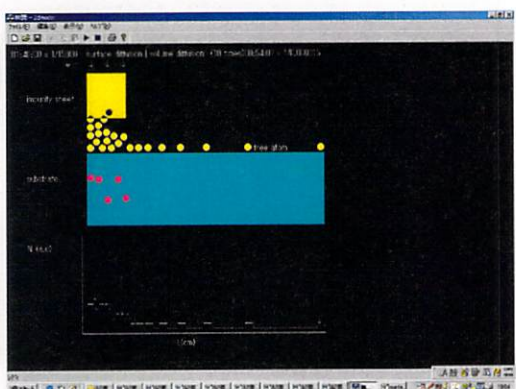


図6 c)  $t_3$  秒後の表面拡散 (ハ)

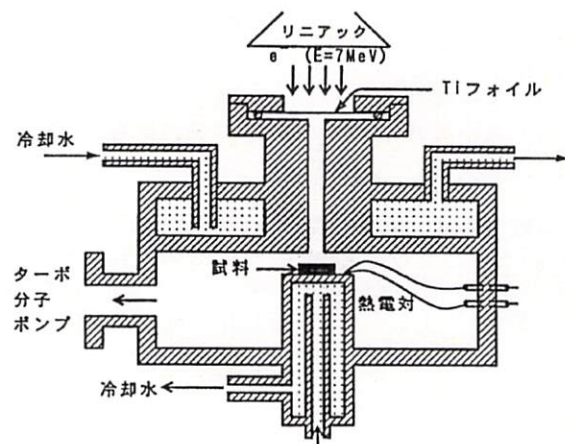


図7 a) 真空電子線照射の概略図

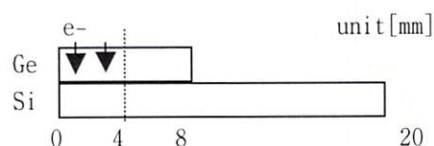


図7 b) 不純物シート一部照射の場合の試料

次の実験では、電子ビームドーピングに基板界面がどのような役割を果たすかを確かめるために、2種類の3層構造を用意した。第1構造は1枚のGeシートを2枚のSiウエーハで各面を接触させてサンドイッチ状に挟んだ構造で、今後Si/Ge/Siと表す。その基板・シートの配置を図7c)に示す。

第2構造Si//Ge//Siと表す。同図7d)に示すように、SiとGeシートの間をスペーサによって1mmの間隔を設けた。スペーサには $1(t) \times 2 \times 2 \text{ mm}^3$ の4枚の石英板を用い、それらを各基板、シートの4隅に置いた。実験ではSi,Geとも(100)面を用いた。それらの大きさはともに $8 \times 8 \text{ mm}^2$ であり、厚さはSiが0.5mmで、Geは0.6mmである。

### 3. 実験方法、結果と考察

#### 3-1 実験方法

電子線照射は名古屋工業技術研究所のLINAC(直線電子線加速器)を使用した。真空電子線照射装置の概略を図7a)にLINACの概略統計図を図7e)に示す。

まず最初の実験では不純物シートに大きさ $8 \times 8 \times 0.45 \text{ mm}^3$ のGe(100)、基板に $7 \times 20 \times 0.63 \text{ mm}^3$ のSi(100)を使用した。これらを図7b)に示すように

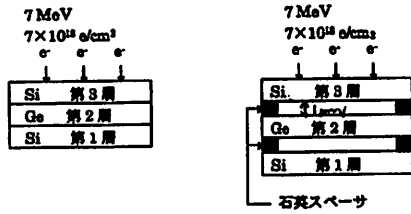


図 7 c) 電子線照射を行った 3 層構造の概略図 第 1 構造  
 図 7 d) 電子線照射を行った 3 層構造の概略図 第 2 構造

Si基板表面は、脱脂水洗を十分行った後、(水)：(フッ化水素)を 5：1 の容量比で混合したエッチング液で 15 秒間化学処理を行った。Geシートは(フッ化水素)：(硝酸)：(酢酸)を 1：1：3 の容積比で混合したエッチング

液で 15 秒間表面の化学処理を行った。化学処理後の脱脂・水洗はSiの場合と同様である。

Si,Geそれぞれの基板およびシートを図に示すように重ねて第1層、第2層および第3層とし、3層構造の第3層の表面に電子線を照射した。そのときの照射条件は、照射エネルギー 7 MeV, 照射量  $7 \times 10^{18} \text{ electrons/cm}^2$ 、繰り返し周波数 200 Hz、パルス幅  $3.5 \mu \text{ sec}$ 、平均電流  $40 \mu \text{ A}$ 、真空度  $10^{-5} \text{ Pa}$ 、照射温度  $50^\circ \text{C}$  であった。電子線照射は名古屋工業技術研究所のLINAC (直線電子線加速器) を使用した。真空電子線照射装置の概略を図 7 a) に LINACの概略統計図を図 7 e) に示す。また、LINAC本体の写真を図 7 f) に示す。照射後各試料表面のAESエネルギースペクトルを観測した。この際のビーム加速電圧は 10 kV、ビームプローブ径は細かくて測定不能であったが経験的に 100 nm程度であろうと推定される。

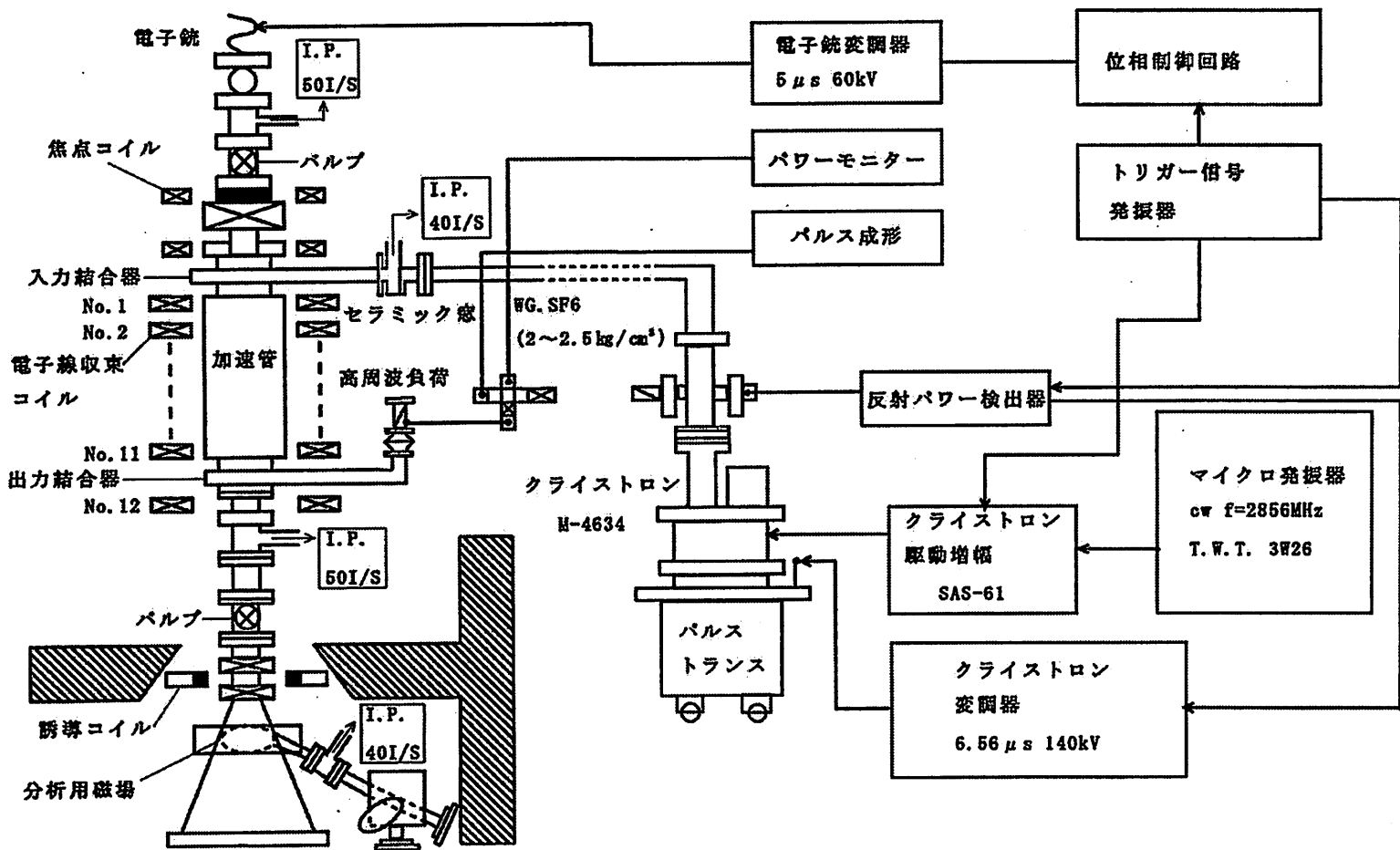


図7e) 名工研電子線照射装置リニアックの構成図



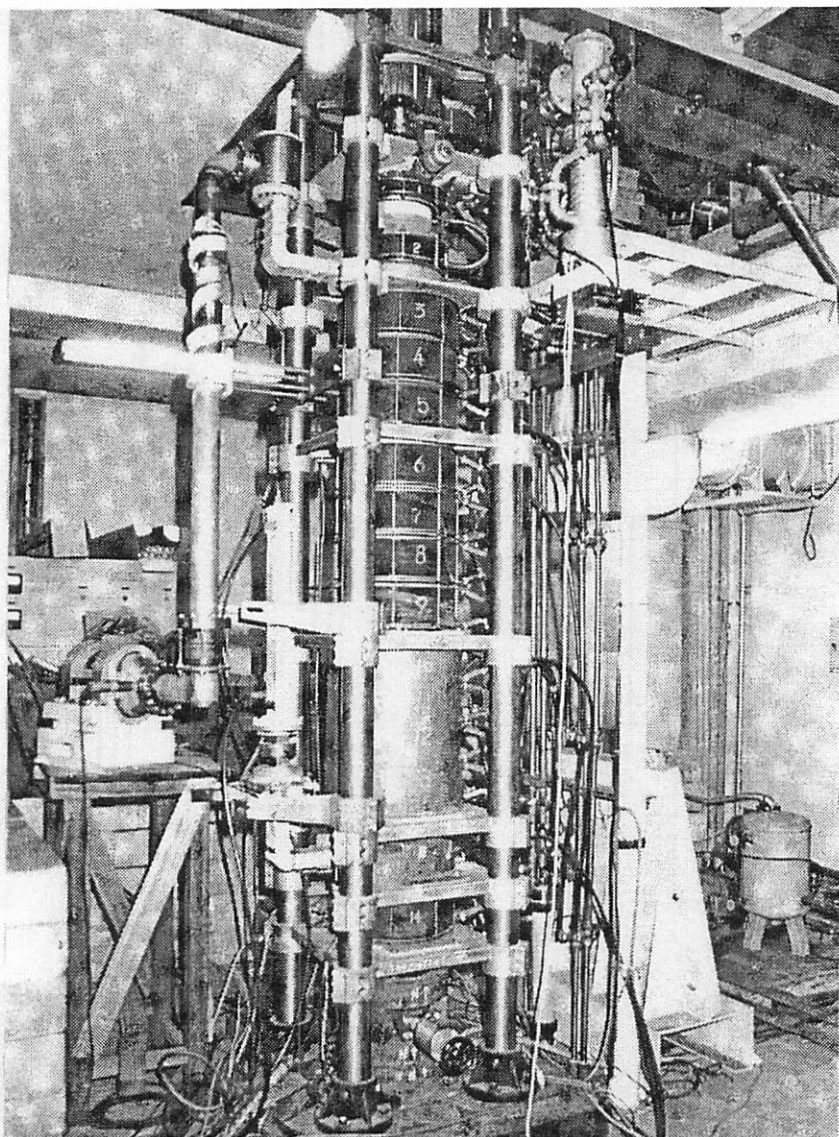


図7f) 線型電子加速器(電子リニアック)の本体

3-2. 実験結果

電子線照射後のSi基板を2次イオン質量分析法 (SIMS) によって測定した。その結果を図8a)に示す。縦軸はGe濃度、横軸は基板左端からの距離である。また、パラメータは基板表面からの深さである。電子線が照射されたのは基板左端から4mmまでであるが、未照射領域にもGe原子の存在が確認できる。これは電子線によって不純物シートからはじき出されたGe原子がSi基板表面に到達し、未照射領域へ表面拡散するためである。それぞれの表面の拡散係数Dと活性化障壁ΔEを表1に示す。ΔEは次の式であたえられる。

基板左端 1 ~ 8 [mm]		
深さ [Å]	D[cm/s]	ΔE
50	$1.16 \times 10^{-4}$	0.138
100	$8.12 \times 10^{-5}$	0.147
200	$6.00 \times 10^{-5}$	0.155
300	$4.41 \times 10^{-5}$	0.163
基板左端 8 ~ 15 [mm]		
深さ [Å]	D[cm/s]	ΔE
50	$2.56 \times 10^{-3}$	0.0510
100	$3.42 \times 10^{-3}$	0.0538
200	$2.40 \times 10^{-3}$	0.0626
300	$1.56 \times 10^{-3}$	0.0734

表1. 表面の拡散係数Dと活性化障壁ΔE

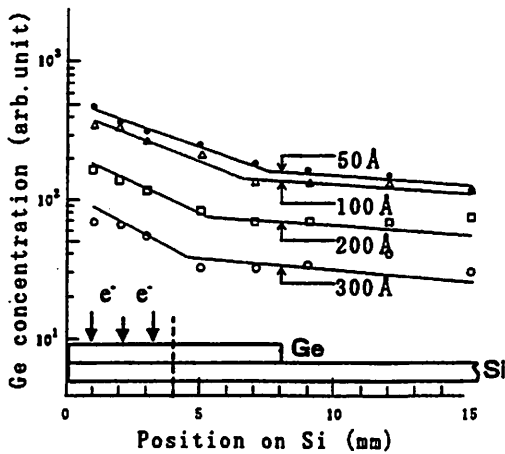


図8a) Si基板の横方向のGe原子濃度分布  
パラメータは基板表面からの深さ  
(不純物シートの一部を照射した場合)

$$Ds = \alpha^2 v \exp(-\Delta E/kT) \quad (2)$$

ただし、 $\alpha$  : Siの格子定数、 $v$  : Si原子の格子間振動数、 $k$  : ボルツマン定数、 $T$  : 温度

$$\alpha^2 v = 1.0 \times 10^{-2} \text{ cm}^2/\text{s} \quad (3)$$

図8b)は第1構造の第1層の照射Si基板側のGe表面から得られたAESスペクトルである。AES測定表面は挿入図の矢印で示してある。SiKLLの信号の他にGeLMMが現れ

ている。ここではGe原子は吸着しており、電子ビームドーピングがなされているを示している。

図8c)は第1構造の第1層のSiの上面から得たスペクトルである。この面からはSiKLLの信号は観察されているがGeLMMの信号は得られていない。

Ge原子の電子ビームドーピングがなされていないことを示している。

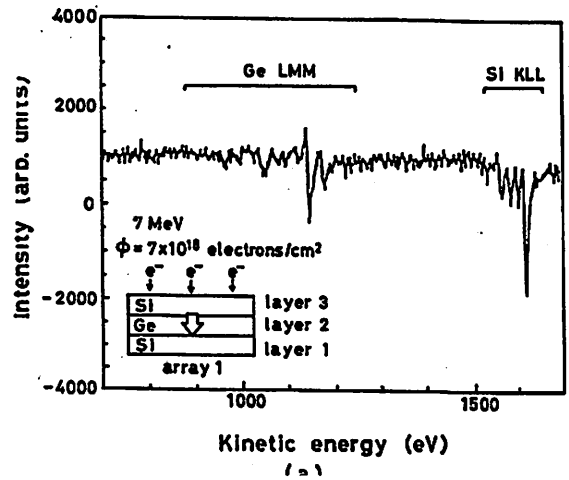


図8b) 第1構造第1層のSi表面のAESスペクトル

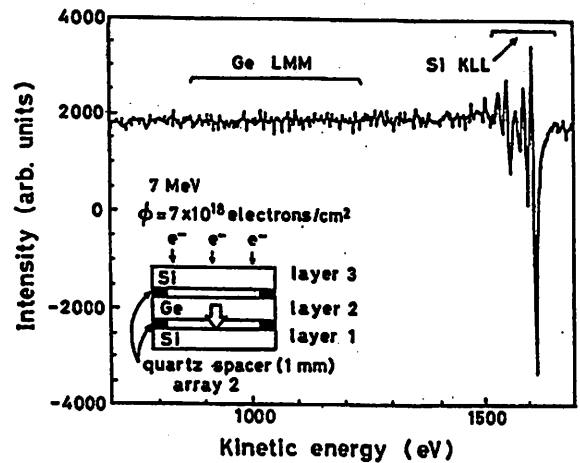


図8c) 第2構造第1層のSi表面のAESスペクトル

3-3. 考察

3-3-1 原子密度と表面拡散

不純物シート殻はじかれた原子がEkというエネルギーを持って基板表面へ到達し、Ekが0になるとポテンシャルの井戸に落ちて吸着する。吸着すると吸着エネルギーEaにより大きいエネルギーを与えられないと原子は移動できない。これを図9に示す。吸着した原子は、表1から分かるように基板左端から8~15mmでは表面の活性化エネルギーが約0.06eVで表面拡散しているが、実際は吸着エネルギー1.03eVより大きいエネルギーでないとは吸着サイトから脱出出来ない。

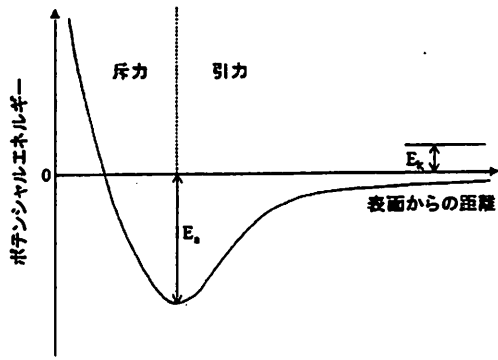


図9 化学吸着原子のポテンシャルエネルギー

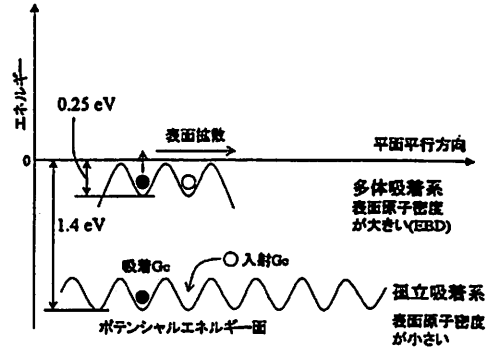


図10 表面原子密度と表面拡散

表面拡散の拡散長 $X_s$ は次の式で示される。

$$X_s^2 = D_s \tau_s \quad (4)$$

ここで $D_s$ は表面拡散係数であり、 $\tau_s$ は吸着の際の平均滞在時間を表す。実験的に求められた $X_s$ の値は約6.6nmであった。また $\tau_s$ は次のように表されることが出来る。

$$\tau_s = \frac{1}{\nu_0} \exp\left(\frac{E_a}{kT}\right) = \tau_0 \exp\left(\frac{E_a}{kT}\right) \quad (5)$$

ここで $\tau_s$ は吸着原子の表面の表面に垂直方向への振動周波数の逆数となる。また $E_a$ は吸着エネルギーであり、それは原子がどの程度表面をカバーしたかの程度に依存する。 $D_s$ は次(1)式で示される。

$$D_s = \alpha^2 \nu \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)$$

ただし、 $\alpha$ : Siの格子定数、 $\nu$ : Si原子の格子振動数、 $k$ : ボルツマン定数、 $T$ : 温度

$$\alpha^2 \nu = 10^{-2} \text{ cm}^2/\text{s} \quad (6)$$

ここで吉信氏らによると吸着した原子に対して後からきた原子が近接サイトに吸着すると原子どうしの相互作用が起きて部分的にポテンシャルエネルギーが減少し吸着原子が脱離しやすくなる(図10)<sup>4)</sup>。表面原子密度が大きい、すなわち多体吸着系の場合吸着原子の近傍サイトに別の原子が吸着する確率が高くなり、表面拡散しやすくなる。表面原子密度が小さい場合、近傍サイトに吸着する確率が低いのでポテンシャルエネルギーの減少が起きにくくなって表面拡散しにくくなる。電子ビームドーピングの場合では吉信氏の論文と比較しても表面の不純物原子密度が高いため、表面の拡散係数が大きくなる。

### 3-3-2 表面での不純物原子の付着係数

図8b)の実験結果では、Ge原子は、Si基板の表側から電子ビームドーピングされておりAESによって検出された。一方、図4c)の実験では、GeとSiの界面に1mmのギャップがあると、電子ビームドーピングされたいことが分かった。この図8c)の実験では、上の方で変位した原子は、真空中で表面から放出されなくて基板に殆んど吸着されていないことを示している。

それ故に電子ビームドーピングは、基板の表面と接触した上の方からのみ起こる。それはとりも直さずウェーハに接触した界面での原子の表面拡散によって起こる。このことは基板表面での不純物原子の付着係数の大きいことを示している。

### 3-3-3 未照射領域の不純物シートの効果 (kick-out機構)

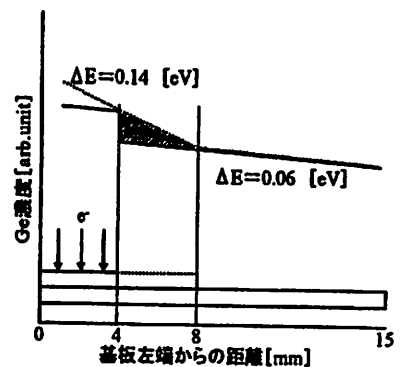


図11 図7c) (Geシート一部照射) とGeシート全面照射の場合のGe濃度分布

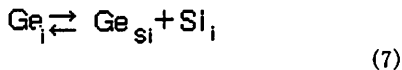
図7c)の実験と比較するため図11に示す実験を行った<sup>5)</sup>。

不純物シートは大きさ $10 \times 10 \times 0.5$ mmのGe (1 1 1)、基板の大きさ $17 \times 30 \times 0.25$ mmのSi (1 1 1) を使用した。この実験は、基板左端から10mmまでを重ね、電子線照射は不純物シート全体に行った。照射条件は電子エネルギーが7 MeV、照射量が $1 \times 10^{18} \text{ e/c m}^2$ 、照射時間21600 sec、照射中温度150℃、気圧 $2.0 \times 10^{-5} \text{ Torr}$ である。この実験の結果を図11に示す。

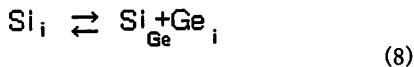
図8から分かるように未照射領域までGe原子が拡散しているが、照射領域から離れるに従って次第に減少していく。不純物シートがない場合の $\Delta E$ は0.06 eVである。

未照射領域不純物シートで覆われている方が0.08eV高い。

(図11斜線の部分) この0.08 eVのエネルギーがKick-outを起こしていると考えられる。Kick-outとは格子間原子が格子位置にある原子を押し出し、自らが格子位置の原子になる拡散機構の一種である。ここでは不純物シートからはじき出されたGe原子がSi基板表面を拡散し、Si基板表面の格子位置のSi原子をはじき出す。その結果Ge原子は格子位置の原子になり、はじき出されたSi原子は格子間原子となって拡散する。その様子を図12に示す。これを式で表すと次のようになる。



この結果、未照射領域でもGe原子がはじき出されるため、図11の斜線部で不純物シートで覆われている方がGe濃度が大きくなると考えられる



この結果、未照射領域でもGe原子がはじき出されるため、図11の斜線部で不純物シートで覆われている方がGe濃度が大きくなると考えられる。

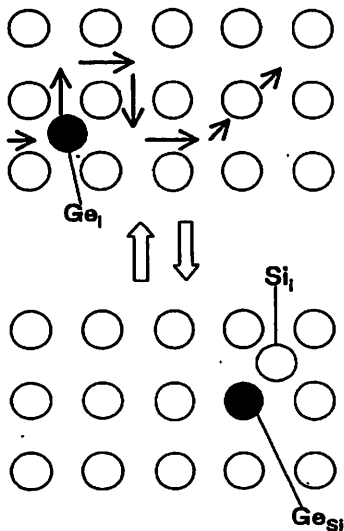


図12 Kick-out Mechanism

#### 4. まとめ

電子ビームドーピングによって生じる表面拡散について考察を行った。その結果、未照射領域で不純物シートに覆われている場合と覆われていない場合で表面の活性化エネルギーに違いがあることが判明した。これにより不純物シートで覆われている所では、Kick-outが起こっていると考えられる。

表面拡散の実験のグラフよりアニメーションは実験と一致する。これにより、超拡散をアニメーションで示すことが出来た。

#### 参考文献

- 1) T.Wada: Proc.3rd, Int.conf.on Neutron Transmutation Doped Silicon, Copenhagen (1980),p447,Plenum press,New York(1981).
- 2) T.Wada and M.Takeda: Proc.4th.Int. Conf.Ion and Plasma Assisted Techniques ,Kyoto,1983,(ed.T.Takagi:Institute of Electrical Engineering of Japan,Tokyo,(1983)p.1747.
- 3) T.Wada and H.Hada: Phys.Rev.B 30(1984) 3384.
- 4) T.Wada, M.Takeda and K.Yasuda: JElectron. Master. 14(1985)171.
- 5) T.Wada and Y.Maeda: Appl.Phys.Lett..51(1987)2130.
- 6) T.Wada: Appl.Phys.Lett.52(1988)1056.
- 7) T.Wada and A.Takeda: Nucl.Instrum. & Methods, Phys. Res. Sect. B 37/38(1989)352.
- 8) T.Wada, Y.Maeda and S.Kojima: Radiat.Eff.Defect Solids 111& 112(1989)471.
- 9) T.Wada and Y.Maeda: Appl.Phys.Lett.52(1988)60.
- 10) T.Wada,R.Abe,A.Takeda,M.Ichimura and M.Takeda: Solid State Electron.33(1990)155.
- 11) T.Wada: Defect and Diffusion Forum 117-118(1995)13.
- 12) T.Wada and K.Yasuda: Phys.Rev.B 53(1996)4770.
- 13) T.Wada,H.fujimoto,D.Toyota,H.Masuda,Y.Yamada and K.Mizusawa: Jpn.JAppl.Phys36(1997)7669.
- 14) T.Wada and H.Fujimoto: Jpn.JAppl.Phys.37(1998)298.
- 15) T.Wada and H.Fujimoto: Jpn.JAppl.Phys.38(1999)7144