

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2010-10522  
(P2010-10522A)

(43) 公開日 平成22年1月14日(2010.1.14)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
HO 1 L 21/265 (2006.01)	HO 1 L 21/265	Z
HO 1 L 21/00 (2006.01)	HO 1 L 21/00	5C034
HO 1 J 37/317 (2006.01)	HO 1 J 37/317	C

審査請求 未請求 請求項の数 5 O L (全 54 頁)

(21) 出願番号	特願2008-169938 (P2008-169938)	(71) 出願人	000005223 富士通株式会社
(22) 出願日	平成20年6月30日 (2008. 6. 30)		神奈川県川崎市中原区上小田中4丁目1番1号
		(74) 代理人	100105337 弁理士 眞鍋 潔
		(74) 代理人	100072833 弁理士 柏谷 昭司
		(74) 代理人	100075890 弁理士 渡邊 弘一
		(74) 代理人	100110238 弁理士 伊藤 壽郎
		(72) 発明者	鈴木 邦広 神奈川県川崎市中原区上小田中4丁目1番1号 富士通株式会社内
		Fターム(参考)	5C034 CC19 CD10

(54) 【発明の名称】 イオン注入分布発生方法

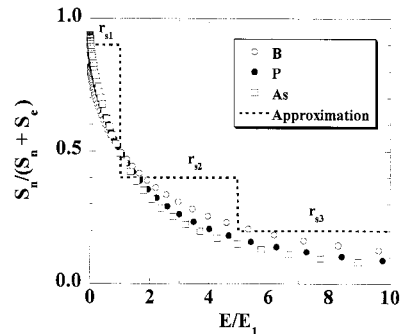
(57) 【要約】

【課題】 イオン注入分布発生方法に関し、2次の拡張LSS理論における摂動計算のモデル式を近似して簡便な $R_p$ 、 $R_p$ 及び $R_{pt}$ を求める。

【解決手段】 2次の拡張LSS理論における摂動計算のモデル式を求める際に、全阻止能( $S_n + S_e$ )に対する核阻止能 $S_n$ の比 $r = S_n / (S_n + S_e)$ を複数のエネルギー領域で区分し、前記区分した各エネルギー領域で前記 $r$ を定数 $r_s$ として扱う。

【選択図】 図2

エネルギー領域区分の説明図



## 【特許請求の範囲】

## 【請求項 1】

エネルギー E で半導体に注入するイオンの飛程 R の射影  $R_p$  の 2 次の項まで考慮した射影  $R_p(E)^{(2)}$  を、1 次の項まで考慮した既知の射影を  $R_p(E)^{(1)}$  とした時に、摂動項  $p^{(2)}(E)$  を用いて、

$$R_p(E)^{(2)} = R_p(E)^{(1)} + p^{(2)}(E)$$

とした近似式を用いた 2 次の摂動モデルを用いて求める際に、全阻止能 ( $S_n + S_e$ ) に対する核阻止能  $S_n$  の比  $r = S_n / (S_n + S_e)$  を複数のエネルギー領域で区分し、前記区分した各エネルギー領域で前記比 r を定数  $r_s$  として扱うことを特徴とするイオン注入分布発生方法。

10

## 【請求項 2】

前記区分するエネルギー領域を、電子阻止能  $S_e$  と核阻止能  $S_n$  とが一致するエネルギーで規格化することを特徴とする請求項 1 記載のイオン注入分布発生方法。

## 【請求項 3】

エネルギーストラッグリング  $\sigma_n^2$  を、飛程  $R(E)$  で結び付けることを特徴とする請求項 1 または 2 に記載のイオン注入分布発生方法。

## 【請求項 4】

前記エネルギーストラッグリング  $\sigma_n^2$  を、飛程  $R(E)$  で結び付ける際のフィッティングパラメータも前記エネルギー領域で区分し、前記区分した各エネルギー領域で前記定数  $r_s$  として扱うことを特徴とする請求項 1 乃至 3 のいずれか 1 項に記載のイオン注入分布発生方法。

20

## 【請求項 5】

前記飛程  $R(E)$  が、エネルギー E に比例する領域と、エネルギーの平方根に比例する領域に区分して計算を行うことを特徴とする請求項 1 乃至 4 のいずれか 1 項に記載のイオン注入分布発生方法。

## 【発明の詳細な説明】

## 【技術分野】

## 【0001】

本発明はイオン注入分布発生方法に関し、2 次の拡張 LSS 理論におけるモーメントを簡単な解析式で表現し、計算速度を向上するとともにモデル式の組み込みを容易にするための手法に関するものである。

30

## 【背景技術】

## 【0002】

シリコン集積回路装置において、シリコン基板への不純物の導入はイオン注入で行われるのが一般的である。

このようなシリコン集積回路装置のプロセス構築に際しては、必要な素子構造を得るためのイオン注入条件を決定する必要があるが、このようなイオン注入条件をシミュレーションにより決定することが行われている。

非晶質層へのイオン注入分布を理論的に予想する手段として Monte Carlo がある。これは、入射イオンと基板との相互作用を、核阻止能及び電子阻止能の物理に基づいて、入射イオンの軌跡を追跡していくものである。

40

## 【0003】

この理論は、任意のイオンを任意の基板にイオン注入した場合の一般的な場合にも有効であり、電子阻止能をチューニングすればその精度をさらに向上させることができる。図 14 は、計算モデルであり、質量数  $M_1$ 、原子番号  $Z_1$ 、エネルギー  $T_{1i}$  (速度  $v_{1i}$ ) のイオンが、基板を構成する質量数  $M_2$ 、原子番号  $Z_2$  の原子と相互作用して伝達するエネルギー  $T_{2f}$  は、散乱角度を  $\theta$ 、相互作用後のイオンの速度を  $v_{1i}$ 、基板原子の速度を  $v_{2i}$  とすると、

$$T_{2f} / T_{1i} = 2 M_2 v_{2i}^2 \sin^2(\theta / 2) / \{ (1/2) M_1 v_{1i}^2 \}$$

$$= (4 M_2 / M_1) \{ [ M_1 v_{1i} / (M_1 + M_2) ]^2 / v_{1i}^2 \} \times \sin^2(\theta /$$

50

$$2) = [4M_2M_1 / (M_1 + M_2)^2] \sin^2(\theta/2) \dots (1)$$

と表現される。

【0004】

ここで、イオンと基板原子の距離を  $r$ 、衝突パラメータを  $b$ 、ポテンシャルエネルギーを  $V(r)$  とすると、伝達エネルギー  $T_{2f}$  は、下記の式 (2) として求まる。

【数1】

$$T_{2f} = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} \cos^2 \left( \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{b}{r^2 \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_c} - \frac{b^2}{r^2}}} dr \right) T_{1i} \dots (2)$$

10

つまり、注入されたイオンは、核との相互作用により、

$$E_n = T_{2f}$$

のエネルギーを失う。

【0005】

また、相互作用に伴う散乱角度  $\theta$  は、下記の式 (3) で表される。

【数2】

$$\Phi = \pi - 2 \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{b}{r^2 \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_c} - \frac{b^2}{r^2}}} dr \dots (3)$$

20

ここで、半径  $b$  の円周上の位置、即ち角度  $\theta$  は、 $\text{Rand}(n)$  を  $n$  が 0 から 1 の間の乱数とすると、

$$\theta = 2 \text{Rand}(n)$$

の関係から求まる。

【0006】

これにより、衝突後のエネルギーと方向が決まる。次に、新たに注入エネルギーで同様の計算を繰り返し、イオンの軌跡をトレースしていけば良い。しかし、実際の衝突のたびに、上記の式 (3) で表される積分を毎回実行するのは計算コストが膨大になるため、Ziegler は Magic formula を提案し、この積分を簡単なプロトコルで解いている。また、シミュレータ TSUPRM では、計算結果をテーブル化しその内挿でこの値を評価している。

【0007】

なお、上記の式 (3) における各パラメータを規格化したユニバーサルな変数で表すと、下記の式 (4) で表される。

30

40

## 【数3】

$$\Phi = \pi - 2 \int_{\rho_{\min}}^{\infty} \frac{\eta}{\rho^2 \sqrt{1 - \frac{f(\rho)}{\epsilon \rho} - \frac{\eta^2}{\rho^2}}} d\rho \quad \dots (4)$$

但し、 $a_B$  をボーア径とすると、

$$= r / a_U,$$

$$= b / a_U,$$

$$a_U = 0.8854 a_B / (Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})$$

である。また、エネルギーは、

$$= E_c / (Z_1 Z_2 e^2 / a_U)$$

$$E_c = (1/2) M_c v_{1i}^2$$

$$1/M_c = 1/M_1 + 1/M_2$$

である。

また、ポテンシャルエネルギー  $V(r)$  として、下記の Ziegler-Litmark-Biersack (ZLB) のポテンシャルエネルギーを用いる (例えば、非特許文献1 参照)。

$$V(r) = (e^2 Z_1 Z_2 / r) f(\quad)$$

但し、

## 【数4】

$$f(\rho) = 0.1818e^{-3.2\rho} + 0.5099e^{-0.9423\rho} + 0.2802e^{-0.4028\rho} + 0.02817e^{-0.2016\rho} \quad \dots (5)$$

## 【0008】

しかしながら、上述の計算コスト低減の手法を導入しても、Monte Carlo シミュレーションは、粒子の各軌跡を追うため、統計誤差を減らすためには数万個以上の計算をする必要があり、時間がかかるという問題がある。

## 【0009】

そこで、電子阻止能  $S_e$ 、核阻止能  $S_n$  が与えられた時、イオン注入分布が従うべき積分方程式が、Lindhart, Scharf, Schiott によって提案され (例えば、非特許文献2 参照)、このモデルは LSS 理論と呼ばれている。

## 【0010】

この理論では、粒子の軌跡を追跡することなしに注入条件が決まれば、積分方程式を解くことによって分布の任意の次数の分布モーメントのエネルギー依存性までを即座に計算できる。

## 【0011】

この場合、積分方程式を展開し、微分方程式に還元し、それを解いていく必要があり、そのステップで近似が入る。

即ち、伝達エネルギーが初期エネルギーに比べて小さいと仮定してモーメントをエネルギーに関して Taylor 展開するが、この展開する次数が解くべき微分方程式の階数となる。

## 【0012】

また、散乱角度もエネルギーに関して Taylor 展開するが、これは解くべき方程式

10

20

30

40

50

の係数と関連し階数とは無関係である。解析モデルは一階の線形微分方程式の場合のみ任意の係数で一般的に得られる。

このLSS理論ではモーメントに関しては1次、散乱角度に関しては2次までTaylor展開し、線形1階の微分方程式を解き飛程Rの射影 $R_p$ 及びそのストラッグリング $R_p$ の解析モデル式を導出している。

【0013】

ここで、図15を参照して、LSS理論における注入イオンの飛程Rに関する積分方程式を説明する。

図15はイオンの飛程Rの模式図であり、エネルギーEで注入されたイオンは基板原子と相互作用しながらエネルギーを失い方向を変えながら図に示すように進んでいき、全エネルギーを失い基板中で静止する。

10

【0014】

この時、イオンが進んだ軌跡の線積分を飛程Rとし、飛程Rの注入方向への射影を $R_p$ 、横方向への広がりを $R_T$ とする。

また、横方向への広がりのx成分を $x$ 、y成分を $y$ とする。

なお、横方向への広がりは、図面及び以降の積分方程式或いは微分方程式においてはRに「垂直記号」のサフィックスを付けた記号で表すが、明細書本文中では、明細書作成の都合上、「 $R_T$ 」で表す。

【0015】

表面に垂直にエネルギーEでイオン注入されたイオンがRと $R + dR$ の間で止まる確率を $P(E, R)$ とする。この場合、

20

【数5】

$$\int_0^{\infty} P(E, R) dR = 1 \quad \dots (6)$$

である。

30

また、Rに関してm次のモーメントを

【数6】

$$\langle R^m(E) \rangle = \int_0^{\infty} R^m P(E, R) dR \quad \dots (7)$$

と定義する。

40

【0016】

イオンが表面から $dR$ 進む間に原子および電子と相互作用する確率は、

$$N dR d_n + N dR d_e \quad \dots (8)$$

であり、そのそれぞれの相互作用でイオンのエネルギーは、

$$E - T_n, E - T_e$$

に減少すると仮定する。

ここで、 $d_n$ 、 $d_e$ は核阻止能及び電子阻止能と関連する微分断面積である。

【0017】

よって、このイオンが原子および電子と相互作用し、エネルギーを失って飛程Rに止まる確率は、

50

【数 7】

$$NdR \int P(E - T_n, R - dR) d\sigma_n + NdR \int P(E - T_e, R - dR) d\sigma_e \quad \dots (9)$$

で与えられる。

また、 $dR$ 進む間に衝突しない確率は、

$$1 - (NdR \int d\sigma_n + NdR \int d\sigma_e) \quad \dots (10)$$

である。この間にエネルギーは失われないから、イオンが $R$ に止まる確率は、

$$[1 - (NdR \int d\sigma_n + NdR \int d\sigma_e)] P(E, R - dR) \quad \dots (11)$$

となる。よって、

【数 8】

$$P(E, R) = NdR \int P(E - T_n, R - dR) d\sigma_n + NdR \int P(E - T_e, R - dR) d\sigma_e \\ + \left[ 1 - \left( NdR \int d\sigma_n + NdR \int d\sigma_e \right) \right] P(E, R - dR) \quad \dots (12)$$

となる。

【0018】

ここで、 $dR$ を無限小に持っていく極限を考えると、

【数 9】

$$\frac{dP(E, R)}{dR} = N \left[ \int P(E - T_n, R) d\sigma_n - \int P(E, R) d\sigma_n \right] \\ + N \left[ \int P(E - T_n, R) d\sigma_e - \int P(E, R) d\sigma_e \right] \quad \dots (13)$$

となる。両辺に $R^m$ をかけて $R$ について0から $\infty$ まで積分すると、

【数 10】

$$\int_0^\infty R^m \frac{dP(E, R)}{dR} dR = N \int_0^\infty R^m \left[ \int P(E - T_n, R) d\sigma_n - \int P(E, R) d\sigma_n \right] dR \\ + N \int_0^\infty R^m \left[ \int P(E - T_n, R) d\sigma_e - \int P(E, R) d\sigma_e \right] dR \quad \dots (14)$$

となる。

【0019】

式(14)の左辺を部分積分し、また右辺の積分の順序を入れ換えると、

【数 1 1】

$$\begin{aligned}
& [R^m P(E, R)]_0^\infty - m \int_0^\infty R^{m-1} P(E, R) dR \\
& = N \left[ \int \int_0^\infty R^m P(E - T_n, R) dR d\sigma_n - \int \int_0^\infty R^m P(E, R) dR d\sigma_n \right] \\
& + N \left[ \int \int_0^\infty R^m P(E - T_e, R) dR d\sigma_e - \int \int_0^\infty R^m P(E, R) dR d\sigma_e \right] \quad \dots (15)
\end{aligned}$$

10

式 (15) における左辺の第 1 項は 0 である。また

【数 1 2】

$$\int_0^\infty R^m P(E, R) dR \equiv \langle R^m(E) \rangle \quad \dots (16)$$

と表現するが、これは  $R^m$  の期待値に相当する。

20

【0 0 2 0】

ここで、式 (16) を用いると、式 (15) は、

【数 1 3】

$$m \langle R^{m-1}(E) \rangle = N \left[ \int [\langle R^m(E) \rangle - \langle R^m(E - T_n) \rangle] d\sigma_n + \int [\langle R^m(E) \rangle - \langle R^m(E - T_e) \rangle] d\sigma_e \right] \quad \dots (17)$$

となり、これが飛程  $R$  に関する  $m$  次の積分方程式である。

30

ここで、飛程  $R$  に関しては 1 次に関してのみ解析する。式 (17) において  $m = 1$  とおいて

【数 1 4】

$$1 = N \left[ \int [\langle R(E) \rangle - \langle R(E - T_n) \rangle] d\sigma_n + \int [\langle R(E) \rangle - \langle R(E - T_e) \rangle] d\sigma_e \right] \quad \dots (18)$$

を得る。これが、飛程  $R$  の従うべき積分方程式である。

40

【0 0 2 1】

次に、式 17 を  $T_n$ ,  $T_e$  の近似のもとで 1 次の項までを残し解いていく。この近似は伝達エネルギーが小さいということを仮定をしている。

この場合、核との相互作用に関しては広角散乱を無視する近似に相当し、電子との相互作用に関しては、エネルギーが高いほど  $T_e$  は大きくなる。このため、比較的エネルギーの低い場合に近似の精度は良くなっていく。

この解を 1 次のものであることを意識して  $R(E)$  <sup>(1)</sup> と表現する。

【0 0 2 2】

次に、式 (18) の両辺を  $N$  で割るとともに Taylor 展開することにより、

【数 1 5】

$$\begin{aligned}
\frac{1}{N} &= \int \left\{ \langle R(E) \rangle^{(1)} - \left[ \langle R(E) \rangle^{(1)} - \frac{d\langle R(E) \rangle^{(1)}}{dE} T_n \right] \right\} d\sigma_n \\
&+ \int \left\{ \langle R(E) \rangle^{(1)} - \left[ \langle R(E) \rangle^{(1)} - \frac{d\langle R(E) \rangle^{(1)}}{dE} T_e \right] \right\} d\sigma_e \\
&= (S_n + S_e) \frac{d\langle R(E) \rangle^{(1)}}{dE} \quad \dots (19)
\end{aligned}$$

10

となる。ここで、

$$S_n = T_n d_n, S_e = T_e d_e \quad \dots (20)$$

を利用している。式(19)より、良く知られている、

【数 1 6】

$$\langle R(E) \rangle^{(1)} = \frac{1}{N} \int_0^E \frac{1}{S_n + S_e} dE \quad \dots (21)$$

20

が導出される。

【0023】

次に、図16を参照して、 $R_p(E, \cos \theta)$ 、 $R_T(E, \cos \theta)$ 、 $R_p(E)$ 、 $R_T(E)$ の幾何学的関係を説明する。

図16は、 $R_p(E, \cos \theta)$ 、 $R_T(E, \cos \theta)$ 、 $R_p(E)$ 、 $R_T(E)$ の幾何学的関係の説明図であり、エネルギーE、角度 $\theta$ で入射したイオンが基板内のA点に静止した状況を模式図的に示している。 30

入射角度 $\theta$ の軸に垂直な面上での横方向の広がりを $R_T(E, \cos \theta)$ とすると、入射方向に垂直な軸に対する射影 $R_p(E)$ が、入射方向に垂直な面に対する横方向広がりが $R_T(E)$ と考えることができる。よって、

【数 1 7】

$$\begin{aligned}
 R_p(E, \cos\varphi) &= OF + FB \\
 &= R_p(E)\cos\varphi + ED \\
 &= R_p(E)\cos\varphi + CD \sin\varphi \\
 &= R_p(E)\cos\varphi + CA \cos\beta \sin\varphi \\
 &= R_p(E)\cos\varphi + R_{\perp}(E) \cos\beta \sin\varphi \quad \dots (22)
 \end{aligned}$$

10

$$\begin{aligned}
 R_{\perp}^2(E, \cos\varphi) &= DA^2 + DB^2 \\
 &= (CA \sin\beta)^2 + (CF - CE)^2 \\
 &= R_{\perp}^2(E)\sin^2\beta + [R_p(E)\sin\varphi - CD \cos\varphi]^2 \\
 &= R_{\perp}^2(E)\sin^2\beta + [R_p(E)\sin\varphi - CA \cos\beta \cos\varphi]^2 \\
 &= R_{\perp}^2(E)\sin^2\beta + [R_p(E)\sin\varphi - R_{\perp}(E)\cos\beta \cos\varphi]^2 \\
 &= R_{\perp}^2(E)\sin^2\beta + R_p^2(E)\sin^2\varphi + R_{\perp}^2(E)\cos^2\beta \cos^2\varphi - 2R_p(E)R_{\perp}(E)\cos\beta \sin\varphi \cos\varphi \quad \dots (23)
 \end{aligned}$$

20

【0024】

以上の幾何学的関係に基づいて、次に、 $R_p$ 、 $R_T$ 、 $R_p R_T$ の従うべき積分方程式を導出していく。

エネルギー  $E$  で、角  $\varphi$  で散乱されたイオンの射影飛程が  $R_p$  と  $R_p + dR_p$  の間で止まる確率を  $P_p(E, R_p, \cos\varphi)$  とする。

$\varphi = 0$  の場合の確率を  $P_p(E, R_p)$  とする。また、 $R_p$  に関して  $m$  次のモーメントを、

30

【数 1 8】

$$\langle R_p^m(E) \rangle = \int_0^{\infty} R_p^m P(E, R) dR \quad \dots (24)$$

と定義する。

【0025】

40

入射イオンが  $dR_p$  進む間に原子および電子と相互作用する確率は、飛程  $R$  の場合と同様に、

$$N dR_p \left( \frac{d}{dn} + N dR_p \frac{d}{de} \right) \dots (25)$$

であり、この相互作用でのエネルギーは、

$$E - T_n, E - T_e$$

に減少する。

【0026】

この場合、電子との相互作用による散乱角は 0 とみなすので、このイオンが原子および電子と相互作用し、エネルギー  $T_n$ 、 $T_e$  を失って  $R_p$  に止まる確率は、

【数 19】

$$NdR_p \int P_p(E - T_n, R_p - dR_p, \cos \varphi) d\sigma_n + NdR_p \int P_p(E - T_e, R_p - dR_p) d\sigma_e \quad \dots (26)$$

で与えられる。

また、 $dR$ 進む間に衝突しない確率は、

$$1 - (NdR_p d\sigma_n + NdR_p d\sigma_e) \quad \dots (27)$$

である。この間にエネルギーは失われないから、イオンが  $R_p$  に止まる確率は、

$$[1 - (NdR_p d\sigma_n + NdR_p d\sigma_e)] P(E, R_p - dR_p) \quad \dots (28)$$

となる。よって、

【数 20】

$$\begin{aligned} P_p(E, R_p) &= NdR_p \int P_p(E - T_n, R_p - dR_p, \cos \varphi) d\sigma_n \\ &\quad + NdR_p \int P_p(E - T_e, R_p - dR_p) d\sigma_e \\ &\quad + \left[ 1 - \left( NdR_p \int d\sigma_n + NdR_p \int d\sigma_e \right) \right] P(E, R_p - dR_p) \end{aligned} \quad \dots (29)$$

となる。

【0027】

ここで、 $dR_p$  を無限小にもっていく極限を考えると、

【数 21】

$$\begin{aligned} \frac{dP_p(E, R_p)}{dR_p} &= N \left[ \int P_p(E - T_n, R_p, \cos \varphi) d\sigma_n - \int P_p(E, R_p) d\sigma_n \right] \\ &\quad + N \left[ \int P_p(E - T_e, R_p) d\sigma_e - \int P_p(E, R_p) d\sigma_e \right] \end{aligned} \quad \dots (30)$$

となり、両辺に  $R_p^m$  をかけて  $R_p$  について 0 から  $R_p$  まで積分すると、

【数 22】

$$\begin{aligned} m \langle R_p^{m-1}(E) \rangle &= N \left[ \int \langle R_p^m(E) \rangle - \langle R_p^m(E - T_n, \cos \varphi) \rangle d\sigma_n \right] \\ &\quad + N \left[ \int \langle R_p^m(E) \rangle - \langle R_p^m(E - T_e) \rangle d\sigma_e \right] \end{aligned} \quad \dots (31)$$

と  $m$  次の  $R_p^m(E)$  に関する積分方程式が導出される。

【0028】

次に、分布の横方向への広がりを表す  $R_T$  について考える。

エネルギー  $E$ 、入射角  $\theta$  で注入されたイオンが  $R_T$  と  $R_T + dR_T$  の間に止まる確率を  $P_T(E, R_T, \cos \theta)$  とする。

この時、入射角  $\theta$  のイオンが  $dR_T$  進む間に原子および電子と相互作用する確率は、  
【数 2 3】

$$NdR_{\perp} \int d\sigma_n + NdR_{\perp} \int d\sigma_e \quad \dots (32)$$

である。よって、このイオンが相互作用しエネルギー  $T_n, T_e$  を失って  $R_T$  に止まる確率は、

【数 2 4】

$$NdR_{\perp} \int P_{\perp}(E - T_n, R_{\perp} - dR_{\perp}, \cos \varphi) d\sigma_n + NdR_{\perp} \int P_{\perp}(E - T_e, R_{\perp}) d\sigma_e \quad \dots (33)$$

で与えられる。

【0029】

この場合も電子との相互作用では角度の変化はなく、さらにこの場合は  $R_T$  も変化しないことを仮定している。また、 $dR_T$  進む間に衝突しない確率は、

【数 2 5】

$$1 - \left( NdR_{\perp} \int d\sigma_n + NdR_{\perp} \int d\sigma_e \right) \quad \dots (34)$$

である。この間にエネルギーは失われず、角度も変化しないため  $R_T$  も変化しない。よって、イオンが  $R_T$  に止まる確率は、

【数 2 6】

$$\left[ 1 - \left( NdR_{\perp} \int d\sigma_n + NdR_{\perp} \int d\sigma_e \right) \right] P_p(E, R_{\perp}) \quad \dots (35)$$

となる。

【0030】

以上より、

10

20

30

40

【数 27】

$$\begin{aligned}
P_{\perp}(E, R_{\perp}) = & NdR_{\perp} \int P_{\perp}(E - T_n, R_{\perp} - dR_{\perp}, \cos \varphi) d\sigma_n \\
& + NdR_{\perp} \int P_{\perp}(E - T_e, R_{\perp}) d\sigma_e \\
& + \left[ 1 - \left( NdR_{\perp} \int d\sigma_n + NdR_{\perp} \int d\sigma_e \right) \right] P_{\perp}(E, R_{\perp}) \quad \dots (36)
\end{aligned}$$

10

となる。

【0031】

ここで、 $dR_{\perp}$  を無限小にもっていく極限を考えると、

【数 28】

$$\begin{aligned}
0 = N \int & [P_{\perp}(E - T_n, R_{\perp}, \cos \varphi) - P_{\perp}(E, R_{\perp})] d\sigma_n \\
& + N \int [P_{\perp}(E - T_e, R_{\perp}) - P_{\perp}(E, R_{\perp})] d\sigma_e \quad \dots (37)
\end{aligned}$$

20

となり、両辺に  $R_{\perp}^m$  をかけて  $R_{\perp}$  について 0 から  $R_{\perp}$  まで積分すると、

【数 29】

$$\begin{aligned}
0 = N \int & [\langle R_{\perp}^m(E) \rangle - \langle R_{\perp}^m(E - T_n, \cos \varphi) \rangle] d\sigma_n \\
& + N \int [\langle R_{\perp}^m(E) \rangle - \langle R_{\perp}^m(E - T_e) \rangle] d\sigma_e \quad \dots (38)
\end{aligned}$$

30

と  $R_{\perp}^m(E)$  に関する積分方程式が導出される。

【0032】

まず、飛程の射影  $R_p$  を求めるために、式(31)において  $m = 1$  とすると下記の式(39)となる。

【数 30】

$$\begin{aligned}
1 = N \left[ \int \langle R_p(E) \rangle - \langle R_p(E - T_n, \cos \varphi) \rangle d\sigma_n \right] \\
+ N \left[ \int \langle R_p(E) \rangle - \langle R_p(E - T_e) \rangle d\sigma_e \right] \quad \dots (39)
\end{aligned}$$

40

ここで、1 次のテーラー展開した解を  $R_p(E)^{(1)}$  とおくと、下記の式(40)となる。

【数 3 1】

$$\begin{aligned}
\frac{1}{N} &= \int \left\{ \langle R_p(E) \rangle^{(1)} - \left[ \langle R_p(E) \rangle^{(1)} - \frac{d\langle R_p(E) \rangle^{(1)}}{dE} T_n \right] \left( 1 - \frac{\mu T_n}{2E} \right) \right\} d\sigma_n \\
&+ \int \left\{ \langle R_p(E) \rangle^{(1)} - \left[ \langle R_p(E) \rangle^{(1)} - \frac{d\langle R_p(E) \rangle^{(1)}}{dE} T_e \right] \right\} d\sigma_e \\
&= (S_n + S_e) \frac{d\langle R_p(E) \rangle^{(1)}}{dE} + \frac{\mu S_n}{2E} \langle R_p(E) \rangle^{(1)} \quad \dots (40)
\end{aligned}$$

10

【0033】

これから、下記の式(41)が得られる。

【数 3 2】

$$\langle R_p(E) \rangle^{(1)} = \frac{1}{N} \frac{\int_0^E \frac{1}{S_n + S_e} \exp[\alpha(E')] dE'}{\exp[\alpha(E)]} \quad \dots (41)$$

20

但し、 $\alpha(E)$  及び  $\alpha(E')$  は、下記の式(42)で表される。

【数 3 3】

$$\alpha(E) = \int_0^E \frac{\mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE', \quad \alpha(E') = \int_0^{E'} \frac{\mu S_n(E'')}{S_n(E'') + S_e(E'')} dE'' \quad \dots (42)$$

30

【0034】

次に、2次のモーメント  $R_p$  及び  $R_{pt}$  を求めるために、式(31)及び式(38)において  $m = 2$  とすると下記の式(43)及び式(44)となる。

【数 3 4】

$$\begin{aligned} \frac{2\langle R_p^2(E) \rangle}{N} &= \int \{ \langle R_p^2(E) \rangle - \langle R_p^2(E - T_n \cos \varphi) \rangle \} d\sigma_n + \int \{ \langle R_p^2(E) \rangle - \langle R_p^2(E - T_e) \rangle \} d\sigma_e \\ &= \int \left\{ \langle R_p^2(E) \rangle - \left[ \cos^2 \varphi \langle R_p^2(E - T_n) \rangle + \frac{1}{2} \sin^2 \varphi \langle R_{\perp}^2(E - T_n) \rangle \right] \right\} d\sigma_n \\ &\quad + \int \{ \langle R_p^2(E) \rangle - \langle R_p^2(E - T_e) \rangle \} d\sigma_e \end{aligned} \quad \dots (43)$$

10

$$\begin{aligned} 0 &= \int \{ \langle R_{\perp}^2(E) \rangle - \langle R_{\perp}^2(E - T_n \cos \varphi) \rangle \} d\sigma_n + \int \{ \langle R_{\perp}^2(E) \rangle - \langle R_{\perp}^2(E - T_e) \rangle \} d\sigma_e \\ &= \int \left\{ \langle R_{\perp}^2(E) \rangle - \left[ \frac{1 + \cos^2 \varphi}{2} \langle R_{\perp}^2(E - T_n) \rangle + \sin^2 \varphi \langle R_p^2(E - T_n) \rangle \right] \right\} d\sigma_n \\ &\quad + N \int \{ \langle R_{\perp}^2(E) \rangle - \langle R_{\perp}^2(E - T_e) \rangle \} d\sigma_e \end{aligned} \quad \dots (44)$$

【0035】

ここで、Lindhart は下記の式 (45) 及び式 (46) で定義される変数  $R_c^2(E)$  及び  $R_r^2(E)$  を導入した。 20

【数 3 5】

$$\langle R_c^2(E) \rangle \equiv \langle R_p^2(E) \rangle + \langle R_{\perp}^2(E) \rangle \quad \dots (45)$$

$$\langle R_r^2(E) \rangle \equiv \langle R_p^2(E) \rangle - \frac{\langle R_{\perp}^2(E) \rangle}{2} \quad \dots (46)$$

【0036】

30

$R_p^2(E)$  と  $R_T^2(E)$  は、変数  $R_c^2(E)$  及び  $R_r^2(E)$  と下記の式 (47) 及び式 (48) で関連づけられる。

【数 3 6】

$$\begin{aligned} \langle \Delta R_p^2(E) \rangle &= \langle R_p^2(E) \rangle - \langle R_p(E) \rangle^2 \\ &= \frac{\langle R_c^2(E) \rangle + 2\langle R_r^2(E) \rangle}{3} - \langle R_p(E) \rangle^2 \end{aligned} \quad \dots (47)$$

$$\langle R_{\perp}^2(E) \rangle = \frac{2}{3} [\langle R_c^2(E) \rangle - \langle R_r^2(E) \rangle] \quad \dots (48) \quad 40$$

【0037】

また、横方向の偏差  $R_{p,t}^2(E)$  は  $X^2$  と関連し、 $R_T^2(E)$  そのものではない。したがって、

$$R_T^2(E) = X^2 + X^2 = 2 R_{p,t}^2(E) \quad \dots (49)$$

となり、これより、

$$R_{p,t}^2(E) = R_T^2(E) / 2 \quad \dots (50)$$

となる。

【0038】

Lindhart はこれらの変数を導入することにより、下記の式 (51) 及び式 (5 50

2) の独立な微分方程式を得ることに成功した。

【数 3 7】

$$\frac{2\langle R_p(E) \rangle}{N} = \int \{ \langle R_c^2(E) \rangle - \langle R_c^2(E - T_n) \rangle \} d\sigma_n + \int \{ \langle R_c^2(E) \rangle - \langle R_c^2(E - T_e) \rangle \} d\sigma_e \quad \dots (51)$$

$$\begin{aligned} \frac{2\langle R_p(E) \rangle}{N} = & \int \{ \langle R_r^2(E) \rangle - (\cos^2\phi - \frac{1}{2}\sin^2\phi) \langle R_r^2(E - T_n) \rangle \} d\sigma_n \\ & + \int \{ \langle R_r^2(E) \rangle - \langle R_r^2(E - T_e) \rangle \} d\sigma_e \quad \dots (52) \end{aligned}$$

【0039】

また、深さ方向のイオン注入分布は  $R_p$  と  $R_p$  を用いて Gauss 分布で大まかに評価できるが、Lindhart は、核阻止能  $S_n$  が支配的であるとして微分断面積を解析的に近似して、下記の式 (53) 及び式 (54) で表される近似解を得ている。

【数 3 8】

$$\langle R_p(E) \rangle = \frac{\langle R(E) \rangle}{1 + \frac{\mu}{3}} \quad \dots (53)$$

$$\langle \Delta R_p^2(E) \rangle = \frac{2}{3} \frac{\mu}{(1 + \mu)^2} \langle R(E) \rangle^2 \quad \dots (54)$$

なお、 $\mu$  は、 $\mu = M_1 / M_2$  である。

【非特許文献 1】J. F. Ziegler, J. P. Biersack, and U. Littmark, The stopping and range of ions in solid, Pergamon, 1885 30

【非特許文献 2】J. Lindhart, M. Scharff, H. Schiott, Mat. Fys. Medd. Vid. Selsk., vol. 33, pp. 1 - 39, 1963

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0040】

しかし、LSS 理論では、積分方程式を解く際に近似が必要で、これまでに提案されているモデルでは  $R_p$  は問題ないが、 $R_p$  は格段に精度が落ちるか、計算できないという問題がある。 40

【0041】

そこで、本発明者は、LSS 積分方程式の 3 次の摂動近似計算により Monte Carlo シミュレーション結果と同程度の精度の解析モデルを得ることに成功している (必要ならば、特願 2008 - 069509 参照)。

【0042】

この高精度のモデルから、 $R_p$  及び  $R_p$  については、2 次のオーダーのモデルで充分精度が高いことが示された。しかしながら、この解析モデル式は微分項や積分項を含む複雑なものであり、誰もが簡便に扱えるものではなかった。

【0043】

したがって、2 次の拡張 LSS 理論における摂動計算のモデル式を近似して簡便な  $R_p$  50

、  $R_p$  及び  $R_{pt}$  を求めることを目的とする。

【課題を解決するための手段】

【0044】

本発明の一観点によると、エネルギー  $E$  で半導体に注入するイオンの飛程  $R$  の射影  $R_p$  の2次の項まで考慮した射影  $R_p(E)^{(2)}$  を、1次の項まで考慮した既知の射影を  $R_p(E)^{(1)}$  とした時に、摂動項  $R_p^{(2)}(E)$  を用いて、

$$R_p(E)^{(2)} = R_p(E)^{(1)} + R_p^{(2)}(E)$$

とした近似式を用いた2次の摂動モデルを用いて求める際に、全阻止能  $(S_n + S_e)$  に対する核阻止能  $S_n$  の比  $r = S_n / (S_n + S_e)$  を複数のエネルギー領域で区分し、前記区分した各エネルギー領域で前記  $r$  を定数  $r_s$  として扱うイオン注入分布発生方法が提供される。

10

【0045】

また、別の観点によると、上述のイオン注入分布発生方法により求めた  $R_p(E)^{(2)}$  及び  $R_{pt}(E)^{(2)}$  を用いてイオン注入分布をガウス分布として発生させるシミュレータが提供される。

【0046】

さらに、別の観点によると、上述イオン注入分布発生方法により  $R_p(E)^{(2)}$ 、 $R_{pt}(E)^{(2)}$  及び  $R_{pt}(E)^{(2)}$  を用いて二次元濃度分布を発生させるシミュレータが提供される。

20

【発明の効果】

【0047】

開示のイオン注入分布発生方法によれば、複雑なモデル式を格段に簡便化しているので、計算速度が向上するとともに、計算式の組み込みが簡単になり、さらに、維持も容易になる。

【発明を実施するための最良の形態】

【0048】

ここで、本発明の前提となる2次の拡張  $LSS$  理論 ( $E2LSS$ ) について、予め説明する。まず、1次及び2次の核阻止能について計算しておく。1次の核阻止能  $S_n(E)$  は、下記の式 (55) で与えられる。

30

【数39】

$$S_n(E) = \pi a_U^2 \int_0^\infty T_{2f} d(\eta^2) = \frac{\pi a_U^2 \gamma T_{1i}}{\varepsilon} S_n(\varepsilon) \quad \dots (55)$$

また、ユニバーサルな核阻止能  $S_n(\varepsilon)$  は、下記の式 (56) で与えられる。

【数40】

40

$$S_n(\varepsilon) = \varepsilon \int_0^\infty \cos^2 \left( \int_{\rho_{\min}}^\infty \frac{\eta}{\rho^2 \sqrt{1 - \frac{f(\rho)}{\varepsilon \rho} - \frac{\eta^2}{\rho^2}}} d\rho \right) d(\eta^2) \quad \dots (56)$$

【0049】

ここで、上述の  $ZLB$  ポテンシャルを利用すると、ユニバーサルな核阻止能  $S_n(\varepsilon)$  は、下記の式 (57) で近似される。

50

【数 4 1】

$$S_n(\varepsilon) \approx \frac{\ln(1 + 1.1383\varepsilon)}{2(\varepsilon + 0.01321\varepsilon^{0.21226} + 0.19593\varepsilon^{0.5})} \quad \dots (57)$$

【0050】

この阻止能は高次のものにも拡張され、2次のモーメントに対応する拡張された核阻止能、即ち、エネルギーストラッグリング  $\Omega_n^2$  は、下記の式(58)で表される。

10

【数 4 2】

$$\Omega_n^2 = \int_0^\infty T_{2f}^2 d\sigma = \pi a_{ij}^2 \frac{(\gamma T_{1i})^2}{\varepsilon^2} \Omega_n^2(\varepsilon) \quad \dots (58)$$

但し、ユニバーサルな拡張された核阻止能  $\Omega_n^2$  ( ) は下記の式(59)で表される。

【数 4 3】

20

$$\Omega_n^2(\varepsilon) = \varepsilon^2 \int_0^\infty \cos^4 \left( \int_{\rho_{\min}}^\infty \frac{\eta}{\rho^2 \sqrt{1 - \frac{f(\rho)}{\varepsilon\rho} - \frac{\eta^2}{\rho^2}}} d\rho \right) d(\eta^2) \quad \dots (59)$$

これも、下記の式(60)で近似的に表現される。

【数 4 4】

30

$$\Omega_n^2(\varepsilon) = \frac{1}{4 + 0.197\varepsilon^{-1.6991} + 6.584\varepsilon^{-1.0494}} \quad \dots (60)$$

【0051】

ここで、上記式(22)及び式(23)に基づいて、以下の計算で利用する各パラメータ  $R_p^2(E, \cos \theta)$ 、 $R_p^3(E, \cos \theta)$ 、 $R_p R_T^2(E, \cos \theta)$  を予め下記の通り計算しておく。

【数 4 5】

$$R_p^2(E, \cos \varphi) = R_p^2(E) \cos^2 \varphi + R_{\perp}^2(E) \sin^2 \varphi \cos^2 \beta + 2R_p(E)R_{\perp}(E) \cos \beta \sin \varphi \cos \varphi \quad \dots (61)$$

$$R_p^3(E, \cos \varphi) = R_p^3(E) \cos^3 \varphi + 3R_p^2(E)R_{\perp}(E) \cos^2 \varphi \sin \varphi \cos \beta \\ + 3R_p(E)R_{\perp}^2(E) \cos \varphi \sin^2 \varphi \cos^2 \beta + R_{\perp}^3(E) \sin^3 \varphi \cos^3 \beta \quad \dots (62)$$

$$R_p R_{\perp}^2(E, \cos \varphi) = R_p(E)R_{\perp}^2(E) [\cos \varphi \sin^2 \beta + \cos^3 \varphi \cos^2 \beta - 2 \sin^2 \varphi \cos \varphi \cos^2 \beta] \\ + R_p^3(E) \cos \varphi \sin^2 \varphi \quad \dots (63)$$

10

【0052】

ここで、上記の図 16 に示したように、空間の対称性から点 C の存在する平面上で C を中心とする半径  $R_{\perp}(E)$  の円上の点は A と等価と考えることができる。

よって、 $\beta$  は 0 から  $2\pi$  の値を同じ確率で取ると仮定できる。

そこで、式 (61) 乃至式 (63) を  $\beta$  に関して 0 から  $2\pi$  まで積分したものを 2 で割りその平均値を評価する。

20

【0053】

【数 4 6】

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin \beta \, d\beta = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos \beta \, d\beta = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos^3 \beta \, d\beta = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin^3 \beta \, d\beta = 0 \quad \dots (64)$$

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos^2 \beta \, d\beta = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin^2 \beta \, d\beta = \frac{1}{2} \quad \dots (65)$$

30

を参考にしてこれらの平均値は、

【数 4 7】

$$\langle R_p(E, \cos \varphi) \rangle = \cos \varphi \langle R_p(E) \rangle \quad \dots (66)$$

$$\langle R_p^2(E, \cos \varphi) \rangle = \cos^2 \varphi \langle R_p^2(E) \rangle + \frac{1}{2} \sin^2 \varphi \langle R_{\perp}^2(E) \rangle \quad \dots (67)$$

$$\langle R_{\perp}^2(E, \cos \varphi) \rangle = \frac{1 + \cos^2 \varphi}{2} \langle R_{\perp}^2(E) \rangle + \sin^2 \varphi \langle R_p^2(E) \rangle \quad \dots (68)$$

40

となる。

【0054】

次に、飛程の射影  $R_p$  について、上記の式 (39) を 2 次まで展開した解を  $R_p(E)$  (2) とおくと、

【数 4 8】

$$\begin{aligned}
\frac{1}{N} &= \int \left\{ \langle R_p(E) \rangle^{(2)} - \left[ \langle R_p(E) \rangle^{(2)} - \frac{d\langle R_p(E) \rangle^{(2)}}{dE} T_n + \frac{1}{2} \frac{d^2\langle R_p(E) \rangle^{(2)}}{dE^2} T_n \right] \left( 1 - \frac{\mu}{2} \frac{T_n}{E} + \frac{(1-2\mu) T_n^2}{8 E^2} \right) \right\} d\sigma_n \\
&+ \int \left\{ \langle R_p(E) \rangle^{(2)} - \left[ \langle R_p(E) \rangle^{(2)} - \frac{d\langle R_p(E) \rangle^{(2)}}{dE} T_e + \frac{1}{2} \frac{d^2\langle R_p(E) \rangle^{(2)}}{dE^2} T_e \right] \right\} d\sigma_e \\
&= (S_n + S_e) \frac{d\langle R_p(E) \rangle^{(2)}}{dE} + \frac{\mu S_n}{2E} \langle R_p(E) \rangle^{(2)} \\
&- \frac{\Omega_n^2 + \Omega_e^2}{2} \frac{d^2\langle R_p(E) \rangle^{(2)}}{dE^2} - \frac{\mu \Omega_n^2}{2E} \frac{d\langle R_p(E) \rangle^{(2)}}{dE} + \frac{(1-2\mu)\Omega_n^2}{8E^2} \langle R_p(E) \rangle^{(2)} \dots (69)
\end{aligned}$$

となる。

但し、 $\sigma_n^2 = T_n^2 d\sigma_n$ 、 $\sigma_e^2 = T_e^2 d\sigma_e$  を利用している。なお、一般に、 $\sigma_e^2 = \sigma_n^2$  であるので、実際の計算では  $\sigma_e^2$  は無視する。

【0055】

上記の式(69)は2階の微分方程式になり、解析的に解くことはできない。そこで摂動近似で2次の近似式  $R_p(E)^{(2)}$  を、計算可能な既知の  $R_p(E)^{(1)}$  と摂動項  $\Delta_p^{(2)}$  を用いて、

$$R_p(E)^{(2)} = R_p(E)^{(1)} + \Delta_p^{(2)}(E) \dots (70)$$

と表現する。

【0056】

この式(70)を上記の式(69)に代入し、 $\sigma_n^2$  と  $\Delta_p^{(2)}$  の積は3次の微小項と見なして落としたのち、上記の1次展開に関する式(40)を利用することによって、

【数 4 9】

$$\begin{aligned}
0 &= (S_n + S_e) \frac{d\Delta_p^{(2)}}{dE} + \frac{\mu S_n}{2E} \Delta_p^{(2)} \\
&- \frac{\Omega_n^2 + \Omega_e^2}{2} \frac{d^2\langle R_p(E) \rangle^{(1)}}{dE^2} - \frac{\mu \Omega_n^2}{2E} \frac{d\langle R_p(E) \rangle^{(1)}}{dE} + \frac{2\mu - 1}{8} \frac{\Omega_n^2}{E^2} \langle R_p(E) \rangle^{(1)} \dots (71)
\end{aligned}$$

が得られ、これより、摂動項  $\Delta_p^{(2)}$  は、下記の式(72)で表される。

【数 5 0】

$$\Delta_p^{(2)} = \frac{\int_0^E \frac{\zeta_p^{(2)}(E')}{S_n + S_e} \exp[\alpha(E')] dE'}{\exp[\alpha(E)]} \dots (72)$$

但し、式(72)における  $\Delta_p^{(2)}(E)$  は下記の式(73)で表される。

【数 5 1】

$$\zeta_p^{(2)}(E) = \frac{\Omega_n^2 + \Omega_e^2 d^2 \langle R_p(E) \rangle^{(1)}}{2 dE^2} + \frac{\mu \Omega_n^2 d \langle R_p(E) \rangle^{(1)}}{2' E dE} - \frac{2\mu - 1 \Omega_n^2}{8 E^2} \langle R_p(E) \rangle^{(1)} \quad \dots (73)$$

【0057】

このように、未知の  $R_p(E)^{(2)}$  を、計算可能な既知の  $R_p(E)^{(1)}$  と摂動項  $p^{(2)}$  により近似することによって、飛程の射影  $R_p$  の 2 次の摂動モデルによる値  $R_p(E)^{(2)}$  を数値的に計算することが可能になる。 10

【0058】

次に、 $R_p$  と  $R_{pt}$  について検討する。

まず、式(51)の積分方程式を 2 次まで展開した解を  $R_c^{(2)}(E)^{(2)}$  とおくと、下記の式(74)が得られる。

【数 5 2】

$$\begin{aligned} \frac{2 \langle R_p(E) \rangle^{(2)}}{N} &= \int \left\{ \langle R_c^2(E) \rangle^{(2)} - \left[ \langle R_c^2(E) \rangle^{(2)} - T_n \frac{d \langle R_c^2(E) \rangle^{(2)}}{dE} + \frac{T_n^2 d^2 \langle R_c^2(E) \rangle^{(2)}}{2 dE^2} \right] \right\} d\sigma_n \\ &+ \int \left\{ \langle R_c^2(E) \rangle^{(2)} - \left[ \langle R_c^2(E) \rangle^{(2)} - T_e \frac{d \langle R_c^2(E) \rangle^{(2)}}{dE} + \frac{T_e^2 d^2 \langle R_c^2(E) \rangle^{(2)}}{2 dE^2} \right] \right\} d\sigma_e \\ &= (S_n + S_e) \frac{d \langle R_c^2(E) \rangle^{(2)}}{dE} - \frac{\Omega_n^2 + \Omega_e^2 d^2 \langle R_c^2(E) \rangle^{(2)}}{2 dE^2} \quad \dots (74) \end{aligned} \quad 20$$

ここで、未知の  $R_c^{(2)}(E)^{(2)}$  を、計算可能な既知の  $R_c^{(2)}(E)^{(1)}$  と摂動項  $c^{(2)}$  を用いて、

$$R_c^{(2)}(E)^{(2)} = R_c^{(2)}(E)^{(1)} + c^{(2)} \quad \dots (75)$$

とにおいて、上記の式(74)を整理すると、左辺は、 30  
 $2 R_p(E)^{(2)} / N = 2 \{ R_p(E)^{(1)} + p^{(2)}(E) \} / N$  であるので、下記の式(76)となる。

【数 5 3】

$$\frac{2 \Delta_p^{(2)}}{N} = (S_n + S_e) \frac{d \Delta_c^{(2)}}{dE} - \frac{\Omega_n^2 + \Omega_e^2 d^2 \langle R_c^2(E) \rangle^{(1)}}{2 dE^2} \quad \dots (76)$$

【0059】

したがって、摂動項  $c^{(2)}$  は、下記の式(77)となる。 40

【数 5 4】

$$\Delta_c^{(2)} = \int_0^E \frac{\zeta_c^{(2)}}{S_n(E') + S_e(E')} dE' \quad \dots (77)$$

但し、式(77)における  $c^{(2)}(E)$  は下記の式(78)で表される。

【数 5 5】

$$\zeta_c^{2(2)}(E) = \frac{2\Delta_p^{(2)}}{N} + \frac{\Omega_n^2 + \Omega_e^2}{2} \frac{d^2 \langle R_c^2(E) \rangle^{(1)}}{dE^2} \quad \dots (78)$$

【0060】

次に、式(52)の積分方程式を2次まで展開した解を  $R_r^2(E)^{(2)}$  とおくと、下記の式(79)が得られる。

【数 5 6】

10

$$\begin{aligned} \frac{2\langle R_p(E) \rangle^{(2)}}{N} &= \int \left\{ \langle R_r^2(E) \rangle^{(2)} - \left( 1 - \frac{3\mu T_n}{2E} + \frac{3(\mu-1)^2 T_n^2}{8E^2} \right) \left[ \langle R_r^2(E) \rangle^{(2)} - T_n \frac{d\langle R_r^2(E) \rangle^{(2)}}{dE} + \frac{T_n^2}{2} \frac{d^2 \langle R_r^2(E) \rangle^{(2)}}{dE^2} \right] \right\} d\sigma_n \\ &\quad + \int \left\{ \langle R_r^2(E) \rangle^{(2)} - \left[ \langle R_r^2(E) \rangle^{(2)} - T_n \frac{d\langle R_r^2(E) \rangle^{(2)}}{dE} + \frac{T_n^2}{2} \frac{d^2 \langle R_r^2(E) \rangle^{(2)}}{dE^2} \right] \right\} d\sigma_e \\ &= (S_n + S_e) \frac{d\langle R_r^2(E) \rangle^{(2)}}{dE} + \frac{3\mu S_n}{2E} \langle R_r^2(E) \rangle^{(2)} \\ &\quad - \frac{\Omega_n^2 + \Omega_e^2}{2} \frac{d^2 \langle R_r^2(E) \rangle^{(2)}}{dE^2} - \frac{3\mu \Omega_n^2}{2E} \frac{d\langle R_r^2(E) \rangle^{(2)}}{dE} - \frac{3(\mu-1)^2 \Omega_n^2}{8E^2} \langle R_r^2(E) \rangle^{(2)} \quad \dots (79) \end{aligned}$$

20

ここでも、未知の  $R_r^2(E)^{(2)}$  を、計算可能な既知の  $R_r^2(E)^{(1)}$  と摂動項  $r^{2(2)}$  を用いて、

$$R_r^2(E)^{(2)} = R_r^2(E)^{(1)} + r^{2(2)} \dots (80)$$

とにおいて、上記の式(79)を整理すると、左辺は、

$$2 \langle R_p(E) \rangle^{(2)} / N = 2 \{ \langle R_p(E) \rangle^{(1)} + p^{(2)}(E) \} / N$$

であるので、下記の式(81)となる。

【数 5 7】

30

$$\begin{aligned} \frac{2\Delta_p^{2(2)}}{N} &= (S_n + S_e) \frac{d\Delta_r^{2(2)}}{dE} + \frac{3\mu S_n}{2E} \Delta_r^{2(2)} \\ &\quad - \frac{\Omega_n^2 + \Omega_e^2}{2} \frac{d^2 \langle R_r^2(E) \rangle^{(1)}}{dE^2} - \frac{3\mu \Omega_n^2}{2E} \frac{d\langle R_r^2(E) \rangle^{(1)}}{dE} - \frac{3(\mu-1)^2 \Omega_n^2}{8E^2} \langle R_r^2(E) \rangle^{(1)} \quad \dots (81) \end{aligned}$$

【0061】

したがって、摂動項  $r^{2(2)}$  は、下記の式(82)となる。

【数 5 8】

40

$$\Delta_r^{2(2)} = \frac{\int_0^E \frac{\zeta_r^{2(2)}}{S_n + S_e} \exp[3\alpha(E')] dE'}{\exp[3\alpha(E)]} \quad \dots (82)$$

但し、式(82)における  $r^{2(2)}(E)$  は下記の式(83)で表される。

【数 5 9】

$$\zeta_r^{2(2)}(E) = \frac{2\Delta_p^{2(2)}}{N} + \frac{\Omega_n^2 + \Omega_e^2 d^2 \langle R_r^2(E) \rangle^{(1)}}{2 dE^2} + \frac{3\mu \Omega_n^2 d \langle R_r^2(E) \rangle^{(1)}}{2 E dE} + \frac{3(\mu-1)^2 \Omega_n^2}{8 E^2} \langle R_r^2(E) \rangle^{(1)} \dots (83)$$

【0062】

以上のパラメータを用いて、2次の摂動モデルによる  $R_p^{(2)}$ 、 $R_{pt}^{(2)}$  を、L 10  
 indhart が1次の摂動モデルで利用したように、

$$\begin{aligned} R_p^2(E) &= R_p^2(E) + R_p(E)^2 \\ &= \{ R_c^2(E) + R_r^2(E) \} / 3 - R_p(E)^2 \end{aligned} \dots (84)$$

$$R_T^2(E) = 2 \{ R_c^2(E) - R_r^2(E) \} / 3 \dots (85)$$

$$R_{pt}^2(E) = R_T^2(E) / 2 \dots (86)$$

で評価する。但し、2次の場合には、1次と異なり、2次摂動モデルであることを意識して表記すると、上記の式(84)の第1式は、

$$\begin{aligned} & [ R_p^2(E)^{(1)} + R_p^2(E)^{(2)} ] \dots (87) \\ & = [ R_p^2(E)^{(1)} + R_p^2(E)^{(2)}(E) ] \\ & - [ R_p(E)^{(1)} + R_p(E)^{(2)}(E) ]^2 \end{aligned} \dots (87)$$

となる。

また、式(85)及び式(86)も同様である。

【0063】

以上の結果を纏めると、 $R_p(E)^{(1)}$  及び  $R_p(E)^{(2)}$  は、下記の式(88)で与えられる。

【数 6 0】

$$\langle R_p(E) \rangle^{(i)}_{i=1, \Delta_{pi=2}} = \int_0^E \frac{\zeta_p^{(i)}}{S_n + S_e} \exp \left[ \int_E^{E'} \frac{\mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' \right] dE' \dots (88)$$

ここで、 $R_p(E)^{(1)}$  及び  $R_p(E)^{(2)}$  に関しては、下記の式(89)及び式(90)であり、 $R_p(E)^{(1)}$  の場合が  $R_p(E)^{(1)}$  を表し、 $R_p(E)^{(2)}$  の場合が  $R_p(E)^{(2)}$  を表す。

【数 6 1】

$$\zeta_p^{(1)} = \frac{1}{N} \dots (89)$$

$$\zeta_p^{(2)}(E) = \frac{\Omega_n^2 d^2 \langle R_p(E) \rangle^{(1)}}{2 dE^2} + \frac{\mu \Omega_n^2 d \langle R_p(E) \rangle^{(1)}}{2 E dE} - \frac{2\mu-1 \Omega_n^2}{8 E^2} \langle R_p(E) \rangle^{(1)} \dots (90)$$

【0064】

また、 $R_c^2(E)^{(1)}$  及び  $R_c^2(E)^{(2)}$  は、下記の式(91)で与えられる。

【数 6 2】

$$\langle R_c^2(E) \rangle_{i=1, \Delta_{ci=2}^{2(i)}} = \int_0^E \frac{\zeta_c^{2(i)}}{S_n(E') + S_e(E')} dE' \quad \dots (91)$$

ここで、 $\zeta_c^{2(1)}$  及び  $\zeta_c^{2(2)}$  に関しては、下記の式 (92) 及び式 (93) であり、 $\zeta_c^{2(1)}$  の場合が  $R_c^2(E)^{(1)}$  を表し、 $\zeta_c^{2(2)}$  の場合が  $R_c^2(E)^{(2)}$  を表す。

【数 6 3】

$$\zeta_c^{2(1)}(E) = \frac{2\langle R_p(E') \rangle^{(1)}}{N} \quad \dots (92)$$

$$\zeta_c^{2(2)}(E) = \frac{2\Delta_p^{(2)}}{N} + \frac{\Omega_n^2 d^2 \langle R_c^2(E') \rangle^{(1)}}{2 dE'^2} \quad \dots (93)$$

【0065】

また、 $R_r^2(E)^{(1)}$  及び  $R_r^2(E)^{(2)}$  は、下記の式 (94) で与えられる。

【数 6 4】

$$\langle R_r^2(E) \rangle_{i=1, \Delta_r^{2(i)}} = \int_0^E \frac{\zeta_r^{2(i)}}{S_n + S_e} \exp \left[ \int_E^E \frac{3\mu S_n(E')}{2E' (S_n(E') + S_e(E'))} dE' \right] dE' \quad \dots (94)$$

ここで、 $\zeta_r^{2(1)}$  及び  $\zeta_r^{2(2)}$  に関しては、下記の式 (95) 及び式 (96) であり、 $\zeta_r^{2(1)}$  の場合が  $R_r^2(E)^{(1)}$  を表し、 $\zeta_r^{2(2)}$  の場合が  $R_r^2(E)^{(2)}$  を表す。

【数 6 5】

$$\zeta_r^{2(1)}(E) = \frac{2\langle R_p(E) \rangle^{(1)}}{N} \quad \dots (95)$$

$$\zeta_r^{2(2)}(E) = \frac{2\Delta_p^{(2)}}{N} + \frac{\Omega_n^2 d^2 \langle R_r^2(E) \rangle^{(1)}}{2 dE^2} + \frac{3\mu \Omega_n^2 d \langle R_r^2(E) \rangle^{(1)}}{2 E dE} + \frac{3(\mu-1)^2 \Omega_n^2 \langle R_r^2(E) \rangle^{(1)}}{8 E^2} \quad \dots (96)$$

【0066】

以上の 2 次の拡張 L S S 理論を基にして、各モーメントを飛程 R に関連づけていく。L S I プロセスで利用されるエネルギー領域は通常は数 10 keV 以下であるが、ウェル形成には 1 MeV 程度の B, P イオン注入が利用される。そこで、ここでは、B, As, P で 1 MeV までのエネルギー領域の近似モデルを導出していく。

【0067】

図 1 (a) は注入されたイオンの飛程 R の入射エネルギー E 依存性の説明図であり、As の飛程 R は単調にエネルギーに比例している。P の飛程 R もほぼ同様であるが、B の飛程 R は 100 keV 以下とそれ以上では明らかに傾きが異なる。これらの不純物による依存性の違いは電子阻止能  $S_e$  と核阻止能  $S_n$  の比に依存すると思われる。そこで、両阻止能が同じになるエネルギー  $E_1$  で規格化した状態で依存性をみしてみる。

【0068】

10

20

30

40

50

図1(b)は、飛程Rの規格化エネルギー依存性の説明図であり、ここでは、飛程Rも  $E/E_1 = 100$  における飛程R ( $E/E_1 = 100$ ) で規格化している。図から明らかのように、各不純物における  $E_1$  は、Bで7 keV、Pで98 eV、Asで697 eVである。よってカバーするエネルギー領域はBで  $150 E_1$ 、Pで  $10 E_1$ 、Asで  $2 E_1$  程度である。

【0069】

このような規格化により、B、P、AsのRのエネルギー依存性はほぼユニバーサルな依存性を示す。 $E/E_1$  が10以下では飛程RはエネルギーEにほぼ比例し、それ以上では  $E^{1/2}$  に比例することが読み取れる。この依存性を後の近似で利用していく。

【0070】

上記の式(88)、式(91)及び式(94)から分かるように、各モデルは一般形として、下記の式(97)の項を含む。

【数66】

$$\exp \left[ \int^E \frac{v \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} \frac{dE'}{2E'} \right] \dots (97)$$

ここで、係数は  $R_p$  では1、 $R_c^2(E)$  では0、 $R_r^2(E)$  では3である。

【0071】

ここで、積分するエネルギー領域を  $S_n / (S_n + S_e)$  が一定と近似できるように小さくとり、その値を  $r_s$  とおくと、式(97)において  $S_n / (S_n + S_e) = r_s$  とすると  $1/E$  の積分になるので、下記の式(98)と簡単化される。

【数67】

$$\begin{aligned} \exp \left[ \int^E \frac{v \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} \frac{dE'}{2E'} \right] &= \exp \left[ \int^E r_s v \mu \frac{1}{2E'} dE' \right] \\ &= \exp \left[ \frac{r_s v \mu}{2} \ln E' \right] \\ &= E^{r_s v \mu / 2} \dots (98) \end{aligned}$$

【0072】

後述するように、最終的に導出されるモデル式は任意の領域および領域数を扱うことができるが、ここでは、図2に示すように、 $E/E_1 = 1, 5, 10$  を区切りの領域とする。10以上の場合はRのエネルギー依存性から電子阻止能  $S_e$  が支配的、即ち、 $r_s = 0$  とする。

【0073】

上記の式(97)の結果はEの関数となる。それが、式(98)の中でEが0からEまでの範囲で積分される。したがって、式(97)が式(98)の中でどのようになっていくかをエネルギーEとEの領域の場合分けを解析していく。表記の簡単化を図るために、

$$E_2 = 5 E_1, E_h = 10 E_1$$

とする。 $E_h$ はこのエネルギー以降は電子阻止能  $S_e$  が支配的として扱う区切りのエネルギーである。

【0074】

次に、入射エネルギーEを場合分けして、上記の式(97)の計算結果を示す。

10

20

30

40

50

( a )  $E = E_1$  の場合、下記の式 ( 9 9 ) となる。

【数 6 8】

$$\begin{aligned} \exp \left[ \int_E^E \frac{v \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' \right] &= \exp \left[ \frac{r_{s1} v \mu}{2} \ln \left( \frac{E'}{E} \right) \right] \\ &= \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s1} v \mu / 2} \quad \dots (99) \end{aligned}$$

10

【0075】

( b )  $E_1 < E = E_2$  の場合はさらに場合分けして、

( b - 1 )  $E = E_1$  の場合には、下記の式 ( 1 0 0 ) となり、

【数 6 9】

$$\begin{aligned} \exp \left[ \int_E^E \frac{v \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' \right] &= \exp \left[ \int_E^{E_1} \frac{v \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' + \int_{E_1}^E \frac{v \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' \right] \\ &= \exp \left[ \frac{r_{s2} v \mu}{2} \ln \left( \frac{E_1}{E} \right) + \frac{r_{s1} v \mu}{2} \ln \left( \frac{E'}{E_1} \right) \right] \\ &= \left( \frac{E_1}{E} \right)^{r_{s2} v \mu / 2} \left( \frac{E'}{E_1} \right)^{r_{s1} v \mu / 2} \quad \dots (100) \end{aligned}$$

20

30

( b - 2 )  $E_1 < E = E_2$  の場合には、下記の式 ( 1 0 1 ) となる。

【数 7 0】

$$\begin{aligned} \exp \left[ \int_E^E \frac{v \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' \right] &= \exp \left[ \frac{r_{s2} v \mu}{2} \ln \left( \frac{E'}{E} \right) \right] \\ &= \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s2} v \mu / 2} \quad \dots (101) \end{aligned}$$

40

【0076】

( c )  $E_2 < E = E_1$  の場合にも場合分けして、

( c - 1 )  $E = E_1$  の場合には、下記の式 ( 1 0 2 ) となり、

【数 7 1】

$$\begin{aligned}
& \exp \left[ \int_E^{E'} \frac{v \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' \right] \\
&= \exp \left[ \int_E^{E_2} \frac{v \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' + \int_{E_2}^{E_1} \frac{v \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' + \int_{E_1}^{E'} \frac{v \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' \right] \\
&= \exp \left[ \frac{r_{s3} v \mu}{2} \ln \left( \frac{E_2}{E} \right) + \frac{r_{s2} v \mu}{2} \ln \left( \frac{E_1}{E_2} \right) + \frac{r_{s1} v \mu}{2} \ln \left( \frac{E'}{E_1} \right) \right] \\
&= \left( \frac{E_2}{E} \right)^{r_{s3} v \mu / 2} \left( \frac{E_1}{E_2} \right)^{r_{s2} v \mu / 2} \left( \frac{E'}{E_1} \right)^{r_{s1} v \mu / 2} \\
&\quad \dots (102)
\end{aligned}$$

(c - 2)  $E_1 < E$   $E_2$  の場合には、下記の式 (103) となり、さらに、  
【数 7 2】

20

$$\begin{aligned}
& \exp \left[ \int_E^{E'} \frac{v \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' \right] \\
&= \exp \left[ \int_E^{E_2} \frac{v \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' + \int_{E_2}^{E'} \frac{v \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' \right] \\
&= \exp \left[ \frac{r_{s3} v \mu}{2} \ln \left( \frac{E_2}{E} \right) + \frac{r_{s2} v \mu}{2} \ln \left( \frac{E'}{E_2} \right) \right] \\
&= \left( \frac{E_2}{E} \right)^{r_{s3} v \mu / 2} \left( \frac{E'}{E_2} \right)^{r_{s2} v \mu / 2} \\
&\quad \dots (103)
\end{aligned}$$

30

(c - 3)  $E_2 < E$   $E_h$  の場合には、下記の式 (104) となる。

【数 7 3】

$$\begin{aligned}
& \exp \left[ \int_E^{E'} \frac{v \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' \right] = \exp \left[ \frac{r_{s3} v \mu}{2} \ln \left( \frac{E'}{E} \right) \right] \\
&= \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s3} v \mu / 2} \\
&\quad \dots (104)
\end{aligned}$$

40

【0077】

(d)  $E_3 < E$  の場合にも場合分けして、

(d - 1)  $E$   $E_1$  の場合には、下記の式 (105) となり、

50

【数 7 4】

$$\begin{aligned}
& \exp \left[ \int_E^E \frac{\nu \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' \right] \\
&= \exp \left[ \int_E^{E_3} \frac{\nu \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' + \int_{E_3}^{E_2} \frac{\nu \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' + \int_{E_2}^{E_1} \frac{\nu \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' + \int_{E_1}^E \frac{\nu \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' \right] \\
&= \exp \left[ \frac{r_{s3} \nu \mu}{2} \ln \left( \frac{E_2}{E_3} \right) + \frac{r_{s2} \nu \mu}{2} \ln \left( \frac{E_1}{E_2} \right) + \frac{r_{s1} \nu \mu}{2} \ln \left( \frac{E}{E_1} \right) \right] \\
&= \left( \frac{E_2}{E_3} \right)^{r_{s3} \nu \mu / 2} \left( \frac{E_1}{E_2} \right)^{r_{s2} \nu \mu / 2} \left( \frac{E}{E_1} \right)^{r_{s1} \nu \mu / 2}
\end{aligned} \tag{105}$$

(d - 2)  $E_1 < E$   $E_2$  の場合には、下記の式 (106) となり、さらに、

【数 7 5】

$$\begin{aligned}
& \exp \left[ \int_E^E \frac{\nu \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' \right] \\
&= \exp \left[ \int_E^{E_3} \frac{\nu \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' + \int_{E_3}^{E_2} \frac{\nu \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' + \int_{E_2}^E \frac{\nu \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' \right] \\
&= \exp \left[ \frac{r_{s3} \nu \mu}{2} \ln \left( \frac{E_2}{E_3} \right) + \frac{r_{s2} \nu \mu}{2} \ln \left( \frac{E}{E_2} \right) \right] \\
&= \left( \frac{E_2}{E_3} \right)^{r_{s3} \nu \mu / 2} \left( \frac{E}{E_2} \right)^{r_{s2} \nu \mu / 2}
\end{aligned} \tag{106}$$

(d - 3)  $E_2 < E$   $E_h$  の場合には、下記の式 (107) となる。

【数 7 6】

$$\begin{aligned}
& \exp \left[ \int_E^E \frac{\nu \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' \right] = \exp \left[ \int_E^{E_3} \frac{\nu \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' + \int_{E_3}^E \frac{\nu \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' \right] \\
&= \exp \left[ \frac{r_{s3} \nu \mu}{2} \ln \left( \frac{E}{E_3} \right) \right] \\
&= \left( \frac{E}{E_3} \right)^{r_{s3} \nu \mu / 2}
\end{aligned} \tag{107}$$

【0078】

なお、

(e)  $E > E_h$  の場合には、電子阻止能  $S_e$  が支配的になり、 $S_n / (S_n + S_e)$  は 50

ほぼ 0 にかかるので、下記の式 ( 1 0 8 ) で近似される。

【数 7 7】

$$\exp \left[ \int_E^E \frac{v \mu S_n(E')}{S_n(E') + S_e(E')} dE' \right] = 1 \quad \dots (108)$$

【0079】

10

次に、二次の核阻止能 ( エネルギーストラッグリング )  $S_n^2$  について検討する。二次の摂動項の中には二次の核阻止能  $S_n^2$  が含まれるが、これを一次の核阻止能  $S_n$  と近似的に関連づける。

【0080】

一次の核阻止能  $S_n$  及び二次の核阻止能  $S_n^2$  はそれぞれユニバーサルな核阻止能  $S_n$  ( ) とユニバーサルなエネルギーストラッグリング  $S_n^2$  ( ) と、下記の式 ( 1 0 9 ) 及び式 ( 1 1 0 ) で関連づけられる。ここで  $a_u$  は上記の式 ( 4 ) の関連で説明した遮蔽距離、  $\varepsilon$  は換算エネルギーである。

【数 7 8】

20

$$S_n(E) = \pi a_u^2 \left( \frac{\gamma E}{\varepsilon} \right) S_n(\varepsilon) \quad \dots (109)$$

$$\Omega_n^2(E) = \pi a_u^2 \left( \frac{\gamma E}{\varepsilon} \right)^2 \Omega_n^2(\varepsilon) \quad \dots (110)$$

なお、 $S_n$  ( )、 $S_n^2$  ( ) はそれぞれ上記の式 ( 5 6 ) 及び式 ( 5 9 ) で与えられ、式における係数  $f$  は、 $f = 4 M_1 M_2 / (M_1 + M_2)^2$  である。ここで、 $f$  ( ) はポテンシャルの遮蔽関数であり、拡張 L S S 理論では Z B L のモデル式を利用していた。ここでは、 $S_n^2$  を  $S_n$  に関連づけるために、より簡単な遮蔽関数を利用する。

30

【0081】

図 1 ( a ) に示したように、エネルギーの低いところで、飛程  $R$  がエネルギー  $E$  にほぼ比例するという事は、この領域では核阻止能  $S_n$  が支配的と考えられるから、 $R(E)$  は、下記の式 ( 1 1 1 ) で近似される。

【数 7 9】

$$\begin{aligned} \langle R(E) \rangle &= \frac{1}{N} \int_0^E \frac{1}{S_n + S_e} dE \\ &\approx \frac{1}{N} \int_0^E \frac{1}{S_n} dE \\ &\approx \frac{1}{N S_n} E \quad \dots (111) \end{aligned}$$

40

【0082】

つまり、 $S_n$  に関していうと、 $S_n$  がエネルギーに依存しないということに相当する。 $S_n$  がエネルギーに依存しないことは  $S_n$  ( ) が  $\varepsilon$  に依存しないことと等価である。そのような  $S_n$  ( ) を与えるポテンシャルは、 $f$  ( ) =  $\dots$  ( 1 1 2 ) である。

50

【 0 0 8 3 】

ここで は適当な正の係数であり、これは以下のように示すことができる。  
 $S_n$  の  $\cos^2$  の引数の積分を  $Q$  とおくと、下記の式 ( 1 1 3 ) で表される。

【 数 8 0 】

$$Q = \int_{\rho_{\min}}^{\infty} \frac{\eta}{\rho^2 \sqrt{1 - \frac{\kappa}{\epsilon \rho^2} - \frac{\eta^2}{\rho^2}}} d\rho \quad \dots (113) \quad 10$$

$$= \int_{\rho_{\min}}^{\infty} \frac{\eta}{\rho^2 \sqrt{1 - \frac{c^2}{\rho^2}}} d\rho$$

但し、

$$c^2 = \frac{\kappa}{\epsilon} + \eta^2 \quad \dots (114)$$

である。

【 0 0 8 4 】

20

ここで、 を変数変換して、

$$x = 1/\rho, \quad dx = -d\rho/\rho^2 \quad \dots (115)$$

とすると、変域は、

$$\rho : \rho_{\min} \rightarrow \infty$$

$$x : x_0 (= 1/\rho_{\min}) \rightarrow 0$$

となる。

【 0 0 8 5 】

よって、式 ( 1 1 3 ) の積分は、下記の式 ( 1 1 6 ) となる。

【 数 8 1 】

30

$$Q = \eta \int_0^{x_0} \frac{dx}{\sqrt{1 - c^2 x^2}}$$

$$= \frac{\eta}{c} \int_0^{x_0} \frac{dx}{\sqrt{\frac{1}{c^2} - x^2}}$$

$$= \frac{\eta}{c} [\arcsin(cx)]_0^{x_0}$$

$$= \frac{\eta}{c} [\arcsin(1) - \arcsin(0)]$$

$$= \frac{\pi\eta}{2c} \quad \dots (116) \quad 40$$

【 0 0 8 6 】

これより、ユニバーサルな核阻止能  $S_n$  ( ) は、下記の式 ( 1 1 7 ) となる。

【数 8 2】

$$S_n(\varepsilon) = \varepsilon \int_0^\infty \cos^2\left(\frac{\pi}{2} \sqrt{1 + \frac{\kappa}{\varepsilon \eta^2}}\right) d(\eta^2) \quad \dots (117)$$

ここで、下記の式 (118) の変数変換を行うと、下記の式 (119) となる。

$$y = \frac{\kappa}{\varepsilon \eta^2} \quad \dots (118)$$

【数 8 3】

$$\begin{aligned} S_n(\varepsilon) &= \varepsilon \frac{\kappa}{\varepsilon} \int_0^\infty \cos^2\left(\frac{\pi}{2} \sqrt{1 + \frac{y}{1+y}}\right) dy \\ &= \kappa I_2 \quad \dots (119) \end{aligned}$$

但し、式 (119) における  $I_2$  は、下記の式 (120) である。

【数 8 4】

$$I_2 \equiv \int_0^\infty \cos^2\left(\frac{\pi}{2} \sqrt{1 + \frac{y}{1+y}}\right) dy = 0.795202 \quad \dots (120)$$

【0087】

一方、エネルギーストラッグリング  $\Omega_n^2(E)$  ( ) は、同じポテンシャルを用いて下記の式 (121) となる。

【数 8 5】

$$\Omega_n^2(\varepsilon) = \kappa \varepsilon I_4 \quad \dots (121)$$

但し、式 (121) における  $I_4$  は、下記の式 (122) である。

【数 8 6】

$$I_4 = \int_0^\infty \cos^4\left(\frac{\pi}{2} \sqrt{1 + \frac{y}{1+y}}\right) dy = 0.267359 \quad \dots (122)$$

【0088】

したがって、エネルギーストラッグリング  $\Omega_n^2(E)$  と核阻止能  $S_n(E)$  の比  $\Omega_n^2(E) / S_n(E)$  は、下記の式 (123) で表される。

10

20

30

40

【数 8 7】

$$\begin{aligned}\frac{\Omega_n^2(E)}{S_n(E)} &= \frac{\gamma E \Omega_n^2(\varepsilon)}{\varepsilon S_n(\varepsilon)} \\ &= \frac{\gamma E \kappa \varepsilon I_4}{\varepsilon \kappa I_2} \\ &= E \frac{I_4}{I_2} \gamma\end{aligned}\quad \dots (123)$$

10

【0089】

これは に依存しない一般的な形式になっている。しかしながら  $I_2$  及び  $I_4$  はポテンシャルに依存する。したがって拡張 L S S 理論で利用する Z B L ポテンシャルではこの値と異なる可能性があるので、これを下記の式 (124) で表される Z B L ポテンシャルの場合の値から評価する。

【数 8 8】

$$\left(\frac{I_4}{I_2}\right)_{ZBL} = \frac{\Omega_n^2(\varepsilon)/\varepsilon^2}{S_n(\varepsilon)/\varepsilon} \quad \dots (124)$$

20

【0090】

図 3 ( a ) は、  $I_4 / I_2$  のユニバーサルエネルギー 依存性の説明図であり、図 3 ( b ) は、各不純物のユニバーサルエネルギー と規格化エネルギー  $E / E_1$  との相関図である。この解析でカバーしようとしている 1 MeV 以下のエネルギー領域は  $10^{-1} < < 10^3$  に相当する。したがって、その比は 1 ~ 0 . 2 程度である。

【0091】

これを近似的に扱うためにパラメータ を導入する。即ち、上記の式 (123) にフィッティングパラメータ を加えることによって、下記の式 (125) が得られる。

【数 8 9】

$$\frac{\Omega_n^2(E)}{S_n(E)} = E \chi \frac{I_4}{I_2} \gamma \quad \dots (125)$$

30

また、全阻止能に対する核阻止能の比  $S_n(E) / (S_n(E) + S_e(E))$  を下記の式 (126) のように、  $r_s$  で置き換えると、下記の式 (127) が得られる。

【数 9 0】

$$r_s = \frac{S_n(E)}{S_n(E) + S_e(E)} \quad \dots (126)$$

40

$$\begin{aligned}\frac{N\Omega_n^2(E)}{E^2} &= \frac{N[S_n(E) + S_e(E)]}{E} r_s \chi \frac{I_4}{I_2} \gamma \\ &\approx \frac{1}{\langle R(E) \rangle} r_s \chi \frac{I_4}{I_2} \gamma\end{aligned}\quad \dots (127)$$

50

## 【 0 0 9 2 】

この式 ( 1 2 7 ) によりエネルギーストラッグリング  $\chi_n^2$  はフィッティングパラメータにより飛程  $R(E)$  と関連付けられる。

なお、ここで表記を簡単化するために、下記の式 ( 1 2 8 ) で表される  $\xi_i$  を導入する。

## 【 数 9 1 】

$$\xi_i = r_{si} \chi_i \frac{I_4}{I_2} \gamma \quad \dots (128)$$

## 【 0 0 9 3 】

10

以上の近似を利用して、次に、2次の拡張 L S S 理論 ( E 2 L S S ) を簡単化していく。まず、 $R_p(E)$  について、上記の式 ( 8 8 ) を上記の式 ( 9 7 ) で示したように、エネルギー領域を規格化したエネルギーで区分して各入射エネルギーに場合分けして計算する。

( A - 1 ) :  $E = E_1$  の場合、1次の項  $R_p(E)^{(1)}$  は、

$\int f(x) g(x) dx = [F(x) g(x)] - F(x) (dg(x)/dx) dx$  の公式を用いて解くことにより、下記の式 ( 1 2 9 ) として得られる。

## 【 数 9 2 】

$$\begin{aligned} \langle R_p(E) \rangle^{(1)} &= \frac{1}{N} \int_0^E \frac{1}{S_n + S_e} \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s1} \frac{\mu}{2}} dE' & 20 \\ &= \left[ \langle R(E') \rangle \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s1} \frac{\mu}{2}} \right]_0^E - \int_0^E \langle R(E') \rangle \frac{d}{dE'} \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s1} \frac{\mu}{2}} dE' \\ &= \langle R(E) \rangle - \frac{r_{s1} \frac{\mu}{2}}{r_{s1} \frac{\mu}{2} + 1} \langle R(E) \rangle \\ &= \frac{1}{r_{s1} \frac{\mu}{2} + 1} \langle R(E) \rangle \quad \dots (129) & 30 \end{aligned}$$

ここでは、飛程  $R(E)$  が  $E$  に比例することを利用している。この式 ( 1 2 9 ) から、 $R_p(E)^{(1)}$  も  $E$  に比例すると近似される。

## 【 0 0 9 4 】

次に、2次の摂動項  $\Delta_p^{(2)}$  は、下記の式 ( 1 3 0 ) となる。

## 【 数 9 3 】

$$\Delta_p^{(2)} = \frac{1}{N} \int_0^E \frac{1}{S_n + S_e} N \zeta_p^{(2)}(E') \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s1} \frac{\mu}{2}} dE' \quad \dots (130) \quad 40$$

但し、式 ( 1 3 0 ) における  $N_p^{(2)}(E)$  は、下記の式 ( 1 3 1 ) である。

【数 9 4】

$$\begin{aligned}
 N\zeta_p^{(2)}(E) &= \frac{N\Omega_n^2}{2} \frac{d^2 \langle R_p(E) \rangle^{(1)}}{dE^2} + \frac{\mu N\Omega_n^2}{2} \frac{d \langle R_p(E) \rangle^{(1)}}{dE} - \frac{2\mu - 1}{8} \frac{N\Omega_n^2}{E^2} \langle R_p(E) \rangle^{(1)} \\
 &= \left( \frac{\mu}{2} - \frac{2\mu - 1}{8} \right) \frac{N\Omega_n^2}{E^2} \langle R_p(E) \rangle^{(1)} \\
 &= \frac{2\mu + 1}{8} \xi_1 \frac{\langle R_p(E) \rangle^{(1)}}{\langle R(E) \rangle}
 \end{aligned}$$

... (131)

10

つまり、 $R_p(E)^{(1)} / R(E)$  は  $E$  についてキャンセルされるので、 $N_p^{(2)}(E)$  は、エネルギー  $E$  に依存しないと近似することができる。

【0095】

この式 (131) を式 (130) に代入して計算すると、下記の式 (132) となり、したがって、2 次の摂動項  $p^{(2)}$  もエネルギー  $E$  に比例していると近似できる。最初の式における右辺は  $E$  に比例する関数であり、したがって、2 回微分で 0 になる。

【数 9 5】

20

$$\begin{aligned}
 \Delta_p^{(2)} &= \frac{1}{N} \int_0^E \frac{1}{S_n + S_e} N\zeta_p^{(2)} \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s1} \frac{\mu}{2}} dE' \\
 &= \left[ \langle R(E') \rangle N\zeta_p^{(2)} \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s1} \frac{\mu}{2}} \right]_0^E - \int_0^E \langle R(E') \rangle N\zeta_p^{(2)} \frac{d}{dE'} \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s1} \frac{\mu}{2}} dE' \\
 &= N\zeta_p^{(2)} \langle R(E) \rangle - N\zeta_p^{(2)} \frac{r_{s1} \frac{\mu}{2}}{r_{s1} \frac{\mu}{2} + 1} \langle R(E) \rangle \\
 &= N\zeta_p^{(2)} \frac{1}{r_{s1} \frac{\mu}{2} + 1} \langle R(E) \rangle \\
 &= \frac{1}{r_{s1} \frac{\mu}{2} + 1} \frac{2\mu + 1}{8} \xi_1 \langle R_p(E) \rangle^{(1)}
 \end{aligned}$$

... (132)

30

【0096】

(A-2) :  $E_1 < E < E_2$  の場合、1 次の項  $R_p(E)^{(1)}$  は下記の式 (133) となる。

【数 9 6】

$$\begin{aligned} \langle R_p(E) \rangle^{(1)} &= \frac{1}{N} \int_0^{E_1} \frac{1}{S_n + S_e} \left( \frac{E'}{E_1} \right)^{r_{s1} \frac{\mu}{2}} \left( \frac{E_1}{E} \right)^{r_{s2} \frac{\mu}{2}} dE' + \frac{1}{N} \int_{E_1}^E \frac{1}{S_n + S_e} \left( \frac{E'}{E_1} \right)^{r_{s2} \frac{\mu}{2}} dE' \\ &= \langle R_p(E_1) \rangle^{(1)} \left( \frac{E_1}{E} \right)^{r_{s2} \frac{\mu}{2}} \\ &\quad + \left[ \langle R(E') \rangle \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s2} \mu} \right]_{E_1}^E - \int_{E_1}^E \langle R(E') \rangle \frac{d}{dE'} \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s2} \frac{\mu}{2}} dE' \end{aligned} \quad 10$$

$$\begin{aligned} &= \langle R_p(E_1) \rangle^{(1)} \left( \frac{E_1}{E} \right)^{r_{s2} \frac{\mu}{2}} \\ &\quad + \left[ \langle R(E) \rangle - \langle R(E_1) \rangle \left( \frac{E_1}{E} \right)^{r_{s2} \mu} \right] - \int_{E_1}^E \langle R(E') \rangle \frac{d}{dE'} \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s2} \frac{\mu}{2}} dE' \\ &= \langle R_p(E_1) \rangle^{(1)} \left( \frac{E_1}{E} \right)^{r_{s2} \frac{\mu}{2}} \\ &\quad + \left[ \langle R(E) \rangle - \langle R(E_1) \rangle \left( \frac{E_1}{E} \right)^{r_{s2} \mu} \right] - \frac{r_{s2} \frac{\mu}{2}}{r_{s2} \frac{\mu}{2} + 1} \left[ \langle R(E) \rangle - \langle R(E_1) \rangle \left( \frac{E_1}{E} \right)^{r_{s2} \mu} \right] \end{aligned} \quad 20$$

$$\begin{aligned} &= \langle R_p(E_1) \rangle^{(1)} \left( \frac{E_1}{E} \right)^{r_{s2} \frac{\mu}{2}} + \frac{1}{r_{s2} \frac{\mu}{2} + 1} \left[ \langle R(E) \rangle - \langle R(E_1) \rangle \left( \frac{E_1}{E} \right)^{r_{s2} \mu} \right] \\ &\quad \dots (133) \end{aligned}$$

【0097】

また、2次の摂動項  $\rho^{(2)}$  は、下記の式(134)となる。

【数 9 7】

$$\begin{aligned} \Delta_p^{(2)} &= \frac{1}{N} \int_0^{E_1} \frac{1}{S_n + S_e} \frac{2\mu + 1}{8} \xi_1 \frac{\langle R_p(E') \rangle^{(1)}}{\langle R(E') \rangle} \left( \frac{E'}{E_1} \right)^{r_{s1} \frac{\mu}{2}} \left( \frac{E_1}{E} \right)^{r_{s2} \frac{\mu}{2}} dE' \\ &\quad + \frac{1}{N} \int_{E_1}^E \frac{1}{S_n + S_e} \frac{2\mu + 1}{8} \xi_2 \frac{\langle R_p(E') \rangle^{(1)}}{\langle R(E') \rangle} \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s2} \frac{\mu}{2}} dE' \\ &= \frac{1}{r_{s1} \frac{\mu}{2} + 1} \frac{2\mu + 1}{8} \xi_1 \langle R_p(E_1) \rangle^{(1)} \left( \frac{E_1}{E} \right)^{r_{s2} \frac{\mu}{2}} \\ &\quad + \frac{1}{r_{s2} \frac{\mu}{2} + 1} \frac{2\mu + 1}{8} \xi_2 \left[ \langle R_p(E) \rangle^{(1)} - \langle R_p(E_1) \rangle^{(1)} \left( \frac{E_1}{E} \right)^{r_{s2} \mu} \right] \\ &= \Delta_p^{(2)}(E_1) + \frac{1}{r_{s2} \frac{\mu}{2} + 1} \frac{2\mu + 1}{8} \xi_2 \left[ \langle R_p(E) \rangle^{(1)} - \langle R_p(E_1) \rangle^{(1)} \left( \frac{E_1}{E} \right)^{r_{s2} \mu} \right] \\ &\quad \dots (134) \end{aligned} \quad 40$$

この積分を実行する際に、 $R_p(E)^{(1)} / R(E)$  はEについてキャンセルされるのでエネルギーEに依存しないと近似している。厳密には、 $R_p(E)^{(1)}$ には  $(E_p / E)$  の  $(r_{s2} \mu / 2)$  乗の項が含まれるため正しくない。

## 【 0 0 9 8 】

しかしながら、もし、 $r_{s1}$  と  $r_{s2}$  が等しければこの項は消失する。即ち、 $(E_1 / E)$  の  $(r_{s2} \mu / 2)$  乗の項は微小項であると考えられる。実際は、 $r_{s1}$  と  $r_{s2}$  は異なるため、無視はできないが、ここでは簡単化のこの近似を用いて積分している。このため、 $r_s$  の値はこの近似を救う役割も担っていると考えられる。以後も同様な近似を利用していく。

## 【 0 0 9 9 】

(A - 3) :  $E_2 < E = E_h$  の場合、1次の項  $R_p(E)^{(1)}$  は下記の式(135)となる。

## 【 数 9 8 】

10

$$\langle R_p(E) \rangle^{(1)} = \frac{1}{N} \int_0^{E_1} \frac{1}{S_n + S_e} \left( \frac{E'}{E_1} \right)^{r_{s1} \frac{\mu}{2}} \left( \frac{E_1}{E_2} \right)^{r_{s2} \frac{\mu}{2}} \left( \frac{E_2}{E} \right)^{r_{s3} \frac{\mu}{2}} dE'$$

$$+ \frac{1}{N} \int_{E_1}^{E_2} \frac{1}{S_n + S_e} \left( \frac{E'}{E_2} \right)^{r_{s2} \frac{\mu}{2}} \left( \frac{E_2}{E} \right)^{r_{s3} \frac{\mu}{2}} dE'$$

$$+ \frac{1}{N} \int_{E_2}^E \frac{1}{S_n + S_e} \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s3} \frac{\mu}{2}} dE'$$

$$= \frac{1}{r_{s1} \frac{\mu}{2} + 1} \langle R(E_1) \rangle \left( \frac{E_1}{E_2} \right)^{r_{s2} \frac{\mu}{2}} \left( \frac{E_2}{E} \right)^{r_{s3} \frac{\mu}{2}}$$

20

$$+ \frac{1}{r_{s2} \frac{\mu}{2} + 1} \left[ \langle R(E_2) \rangle - \langle R(E_1) \rangle \left( \frac{E_1}{E_2} \right)^{r_{s2} \mu} \right] \left( \frac{E_2}{E} \right)^{r_{s3} \frac{\mu}{2}}$$

$$+ \frac{1}{r_{s3} \frac{\mu}{2} + 1} \left[ \langle R(E) \rangle - \langle R(E_2) \rangle \left( \frac{E_2}{E} \right)^{r_{s3} \frac{\mu}{2}} \right]$$

$$= \langle R_p(E_2) \rangle^{(1)} \left( \frac{E_2}{E} \right)^{r_{s3} \frac{\mu}{2}} + \frac{1}{r_{s3} \frac{\mu}{2} + 1} \left[ \langle R(E) \rangle - \langle R(E_2) \rangle \left( \frac{E_2}{E} \right)^{r_{s3} \frac{\mu}{2}} \right]$$

... (135)

30

## 【 0 1 0 0 】

また、2次の摂動項  $p^{(2)}$  は、同様にして下記の式(136)となる。

## 【 数 9 9 】

$$\Delta_p^{(2)} = \Delta_p^{(2)}(E_2) \left( \frac{E_2}{E} \right)^{r_{s3} \frac{\mu}{2}} + \frac{1}{r_{s2} \frac{\mu}{2} + 1} \frac{2\mu + 1}{8} \xi_2 \left[ \langle R_p(E) \rangle^{(1)} - \langle R_p(E_2) \rangle^{(1)} \left( \frac{E_2}{E} \right)^{r_{s3} \mu} \right]$$

... (136)

40

## 【 0 1 0 1 】

(A - 4) :  $E > E_h$  の場合、1次の項  $R_p(E)^{(1)}$  は下記の式(137)となる。

。

【数 1 0 0】

$$\begin{aligned}
\langle R_p(E) \rangle^{(1)} &= \frac{1}{N} \int_0^{E_1} \frac{1}{S_n + S_e(E')} r_{s1} \frac{\mu}{2} \left( \frac{E_1}{E_2} \right) r_{s2} \frac{\mu}{2} \left( \frac{E_2}{E} \right) r_{s3} \frac{\mu}{2} dE' \\
&+ \frac{1}{N} \int_{E_1}^{E_2} \frac{1}{S_n + S_e(E')} r_{s2} \frac{\mu}{2} \left( \frac{E_2}{E} \right) r_{s3} \frac{\mu}{2} dE' \\
&+ \frac{1}{N} \int_{E_2}^{E_h} \frac{1}{S_n + S_e(E')} r_{s3} \frac{\mu}{2} dE' \\
&+ \frac{1}{N} \int_{E_h}^E \frac{1}{S_n + S_e} dE' \\
&= \langle R_p(E_h) \rangle^{(1)} + \frac{1}{N} \int_{E_h}^E \frac{1}{S_n + S_e} \left( \frac{E'}{E} \right) r_{s3} \frac{\mu}{2} dE' \quad \dots (137)
\end{aligned}$$

10

20

【0 1 0 2】

ここで、式(137)における最後の積分の項を検討する。このエネルギー領域では近似的に電子阻止能  $S_e$  のみを考慮するので、電子阻止能  $S_e$  と関連する飛程  $R_{max}$  を下記の式(138)で定義し、

【数 1 0 1】

$$\langle R_{max}(E) \rangle = \frac{1}{N} \int_0^E \frac{1}{S_e} dE' \quad \dots (138)$$

30

電子阻止能を下記の式(139)とする。

【数 1 0 2】

$$S_e(E) = k_e \sqrt{E} \quad \dots (139)$$

【0 1 0 3】

上記の式(139)を式(138)に代入すると、下記の式(140)が得られ、これは、 $E > E_h$  のエネルギー領域では飛程  $R_{max}$  がエネルギーの平方根に比例することを表している。

40

【数 1 0 3】

$$\begin{aligned}
\langle R_{max}(E) \rangle &= \frac{1}{N} \int_0^E \frac{1}{k_e \sqrt{E'}} dE' \\
&= \frac{2}{N k_e} \sqrt{E} \quad \dots (140)
\end{aligned}$$

50

【 0 1 0 4 】

したがって、最後の積分は、下記の式 ( 1 4 1 ) となる。

【 数 1 0 4 】

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \int_{E_h}^E \frac{1}{S_n + S_e} \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s3} \frac{\mu}{2}} dE' &= \langle R_{\max}(E) \rangle - \langle R_{\max}(E_h) \rangle \\ &\approx \langle R(E) \rangle - \langle R(E_h) \rangle \quad \dots (141) \end{aligned}$$

また、2次の摂動項  $p^{(2)}$  は、

$$p^{(2)} = p^{(2)}(E_h) \quad \dots (142)$$

となる。

【 0 1 0 5 】

次に、 $R_c^2(E)$  について、上記の式 ( 9 1 ) を上記の式 ( 9 7 ) で示したように、エネルギー領域を規格化したエネルギーで区分して各入射エネルギーに場合分けして計算する。

( B - 1 ) :  $E = E_1$  の場合、1次の項  $R_c^2(E)^{(1)}$  は、下記の式 ( 1 4 3 ) として得られる。

【 数 1 0 5 】

$$\begin{aligned} \langle R_c^2(E) \rangle^{(1)} &= \frac{1}{N} \int_0^E \frac{1}{S_n + S_e} 2 \langle R_p \rangle^{(1)} dE' \\ &= \left[ \langle R(E') \rangle 2 \langle R_p(E') \rangle^{(1)} \right]_0^E - \int_0^E \langle R(E') \rangle 2 \frac{d}{dE'} \langle R_p(E') \rangle^{(1)} dE' \\ &= 2 \langle R(E) \rangle \langle R_p(E) \rangle^{(1)} - \langle R(E) \rangle \langle R_p(E) \rangle^{(1)} \\ &= \langle R(E) \rangle \langle R_p(E) \rangle^{(1)} \quad \dots (143) \end{aligned}$$

30

ここでは、飛程  $R(E)$  及び  $R_p(E)^{(1)}$  が  $E$  に比例することを利用している。また、この式 ( 1 4 3 ) から、 $R_c^2(E)^{(1)}$  が  $E^2$  に比例すると近似できることがわかる。

【 0 1 0 6 】

次に、2次の摂動項  $c^{(2)}$  は、下記の式 ( 1 4 4 ) となる。

【 数 1 0 6 】

$$\Delta_c^{2(2)} = \frac{1}{N} \int_0^E \frac{1}{S_n + S_e} N \zeta_c^{(2)}(E') dE' \quad \dots (144)$$

40

但し、式 ( 1 4 4 ) における  $N c^{(2)}(E)$  は、下記の式 ( 1 4 5 ) である。

【数 1 0 7】

$$\begin{aligned}
 N\zeta_c^{2(2)}(E) &= 2\Delta_p^{(2)} + \frac{N\Omega_n^2}{2} \frac{d^2 \langle R_c^2(E) \rangle^{(1)}}{dE^2} \\
 &= 2\Delta_p^{(2)} + \frac{N\Omega_n^2}{E^2} \langle R_c^2(E) \rangle^{(1)} \\
 &= 2\Delta_p^{(2)} + \xi_1 \frac{\langle R_c^2(E) \rangle^{(1)}}{\langle R(E) \rangle} \dots (145)
 \end{aligned}$$

10

つまり、 $N\zeta_c^{2(2)}(E)$  は、エネルギー  $E$  に比例すると近似することができる。

【0 1 0 7】

この式 (145) を式 (144) に代入して計算すると、下記の式 (146) となり、したがって、2 次の摂動項  $\zeta_c^{2(2)}$  もエネルギー  $E^2$  に比例する。

【数 1 0 8】

$$\begin{aligned}
 \Delta_c^{2(2)} &= \frac{1}{N} \int_0^E \frac{1}{S_n + S_e} N\zeta_c^{2(2)}(E') dE' \\
 &= [\langle R(E') \rangle N\zeta_c^{2(2)}(E')]_0^E - \int_0^E \langle R(E') \rangle \frac{d}{dE'} (N\zeta_c^{2(2)}(E')) dE' \\
 &= \langle R(E) \rangle N\zeta_c^{2(2)}(E) - \frac{1}{2} \langle R(E) \rangle N\zeta_c^{2(2)}(E) \\
 &= \Delta_p^{(2)} \langle R(E) \rangle + \frac{\xi_1}{2} \langle R_c^2(E) \rangle^{(1)} \dots (146)
 \end{aligned}$$

20

【0 1 0 8】

(B-2) :  $E_1 < E < E_2$  の場合、1 次の項  $R_c^2(E)^{(1)}$  は下記の式 (147) となる。

30

【数 1 0 9】

$$\begin{aligned}
 \langle R_c^2(E) \rangle^{(1)} &= \frac{1}{N} \int_0^{E_1} \frac{1}{S_n + S_e} 2 \langle R_p(E') \rangle^{(1)} dE' + \frac{1}{N} \int_{E_1}^E \frac{1}{S_n + S_e} 2 \langle R_p(E') \rangle^{(1)} dE' \\
 &= \langle R_c^2(E) \rangle^{(1)} \\
 &\quad + 2 [\langle R(E') \rangle \langle R_p(E') \rangle^{(1)}]_{E_1}^E - 2 \int_{E_1}^E \langle R(E') \rangle \langle R_p(E') \rangle^{(1)} dE' \\
 &= \langle R_c^2(E) \rangle^{(1)} + [\langle R(E) \rangle \langle R_p(E) \rangle^{(1)} - \langle R(E_1) \rangle \langle R_p(E_1) \rangle^{(1)}] \dots (147)
 \end{aligned}$$

40

【0 1 0 9】

また、2 次の摂動項  $\zeta_c^{2(2)}$  は、下記の式 (148) となる。

【数 1 1 0】

$$\begin{aligned} \Delta_c^{2(2)} &= \frac{1}{N} \int_0^{E_1} \frac{1}{S_n + S_e} N \zeta_c^{2(2)}(E') dE' + \frac{1}{N} \int_{E_1}^E \frac{1}{S_n + S_e} N \zeta_c^{2(2)}(E') dE' + \\ &= \Delta_c^{2(2)}(E_1) \\ &+ \left\{ \left[ \Delta_p^{(2)}(E) \langle R(E) \rangle + \frac{\xi_2}{2} \langle R_c^2(E) \rangle^{(1)} \right] - \left[ \Delta_p^{(2)}(E_1) \langle R(E_1) \rangle + \frac{\xi_2}{2} \langle R_c^2(E_1) \rangle^{(1)} \right] \right\} \end{aligned}$$

・・・(148)

10

この積分を実行する際に、 $\zeta_c^{2(2)}(E)$  はエネルギー  $E$  に比例すると近似している。

【0 1 1 0】

(B-3) :  $E_2 < E < E_h$  の場合、1次の項  $R_c^2(E)^{(1)}$  は下記の式(149)となる。

【数 1 1 1】

$$\begin{aligned} \langle R_c^2(E) \rangle^{(1)} &= \frac{1}{N} \int_0^{E_1} \frac{1}{S_n + S_e} 2 \langle R_p(E') \rangle^{(1)} dE' \\ &+ \frac{1}{N} \int_{E_1}^{E_2} \frac{1}{S_n + S_e} 2 \langle R_p(E') \rangle^{(1)} dE' \\ &+ \frac{1}{N} \int_{E_2}^E \frac{1}{S_n + S_e} 2 \langle R_p(E') \rangle^{(1)} dE' \\ &= \langle R_c^2(E_2) \rangle^{(1)} + \left[ \langle R(E) \rangle \langle R_p(E) \rangle^{(1)} - \langle R(E_2) \rangle \langle R_p(E_2) \rangle^{(1)} \right] \quad \dots (149) \end{aligned}$$

20

【0 1 1 1】

また、2次の摂動項  $\zeta_c^{2(2)}$  は、下記の式(150)となる。

【数 1 1 2】

$$\begin{aligned} \Delta_c^{2(2)} &= \frac{1}{N} \int_0^{E_1} \frac{1}{S_n + S_e} N \zeta_c^{2(2)}(E') dE' \\ &+ \frac{1}{N} \int_{E_1}^{E_2} \frac{1}{S_n + S_e} N \zeta_c^{2(2)}(E') dE' \\ &+ \frac{1}{N} \int_{E_2}^E \frac{1}{S_n + S_e} N \zeta_c^{2(2)}(E') dE' \\ &= \Delta_c^{2(2)}(E_2) \\ &+ \left\{ \left[ \Delta_p^{(2)}(E) \langle R(E) \rangle + \frac{\xi_2}{2} \langle R_c^2(E) \rangle^{(1)} \right] - \left[ \Delta_p^{(2)}(E_2) \langle R(E_2) \rangle + \frac{\xi_2}{2} \langle R_c^2(E_2) \rangle^{(1)} \right] \right\} \\ &\quad \dots (150) \end{aligned}$$

40

【0 1 1 2】

(B-4) :  $E > E_h$  の場合、1次の項  $R_c^2(E)^{(1)}$  は下記の式(151)となる。

【数 1 1 3】

$$\begin{aligned}
\langle R_c^2(E) \rangle^{(1)} &= \frac{1}{N} \int_0^{E_1} \frac{1}{S_n + S_e} 2 \langle R_p(E') \rangle^{(1)} dE' \\
&+ \frac{1}{N} \int_{E_1}^{E_2} \frac{1}{S_n + S_e} 2 \langle R_p(E') \rangle^{(1)} dE' \\
&+ \frac{1}{N} \int_{E_2}^{E_h} \frac{1}{S_n + S_e} 2 \langle R_p(E') \rangle^{(1)} dE' \\
&+ \frac{1}{N} \int_{E_h}^E \frac{1}{S_n + S_e} 2 \langle R_p(E') \rangle^{(1)} dE' \\
&= \langle R_c^2(E_h) \rangle^{(1)} + \frac{1}{N} \int_{E_h}^E \frac{1}{S_n + S_e} 2 \langle R_p(E') \rangle^{(1)} dE' \quad \dots (151)
\end{aligned}$$

【0 1 1 3】

ここで、式(151)における最後の積分の項を検討する。このエネルギー領域では近似的に電子阻止能  $S_e$  のみを考慮するので、上述の式(141)と同様に、下記の式(152)となる。

【数 1 1 4】

$$\begin{aligned}
\frac{1}{N} \int_{E_h}^E \frac{1}{S_n + S_e} 2 \langle R_p(E') \rangle^{(1)} dE' &\approx \frac{1}{N} \int_{E_h}^E \frac{2}{k_e \sqrt{E'}} \frac{2}{N k_e} (\sqrt{E'} - \sqrt{E_h}) dE' \\
&= \left( \frac{2}{N k_e} \right)^2 \int_{E_h}^E \left( 1 - \sqrt{\frac{E_h}{E'}} \right) dE' \\
&= \left( \frac{2}{N k_e} \right)^2 (\sqrt{E} - \sqrt{E_h})^2 \\
&= [\langle R_{\max}(E) \rangle - \langle R_{\max}(E_h) \rangle]^2 \\
&\approx [\langle R(E) \rangle - \langle R(E_h) \rangle]^2 \quad \dots (152)
\end{aligned}$$

【0 1 1 4】

上記の式(152)を式(151)に代入すると、下記の式(153)が得られる。

【数 1 1 5】

$$\langle R_c^2(E) \rangle^{(1)} = \langle R_c^2(E_h) \rangle^{(1)} + [\langle R(E) \rangle - \langle R(E_h) \rangle]^2 \quad \dots (153)$$

また、2次の摂動項  $c^{(2)}$  は、

$$c^{(2)} = c^{(2)}(E_h) \quad \dots (154)$$

となる。

【0 1 1 5】

次に、 $R_r^2(E)$  について、上記の式(94)を上記の式(97)で示したように、エネルギー領域を規格化したエネルギーで区分して各入射エネルギーに場合分けして計算する。

(C-1) :  $E = E_1$  の場合、1次の項  $R_r^2(E)^{(1)}$  は、下記の式(155)として得られる。

【数 1 1 6】

$$\begin{aligned}
\langle R_r^2(E) \rangle^{(1)} &= \frac{1}{N} \int_0^E \frac{1}{S_n + S_e} 2 \langle R_p(E') \rangle^{(1)} \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s1} \frac{3\mu}{2}} dE' \\
&= \left[ \langle R(E') \rangle 2 \langle R_p(E') \rangle^{(1)} \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s1} \frac{3\mu}{2}} \right]_0^E - \int_0^E \langle R(E') \rangle 2 \frac{d}{dE'} \left[ \langle R_p(E') \rangle^{(1)} \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s1} \frac{3\mu}{2}} \right] dE' \\
&= 2 \langle R_p(E') \rangle^{(1)} \langle R(E) \rangle - \frac{r_{s1} \frac{3\mu}{2} + 1}{r_{s1} \frac{3\mu}{2} + 2} 2 \langle R_p(E') \rangle^{(1)} \langle R(E) \rangle \\
&= \frac{2}{r_{s1} \frac{3\mu}{2} + 2} \langle R(E) \rangle
\end{aligned}$$

・・・(155)

【0 1 1 6】

また、2次の摂動項  $r^{2(2)}$  は、下記の式(156)となる。

【数 1 1 7】

$$\Delta_r^{2(2)} = \frac{1}{N} \int_0^E \frac{1}{S_n + S_e} N \zeta_r^{2(2)}(E') \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s1} \frac{3\mu}{2}} dE'$$

・・・(156)

但し、式(156)における  $r^{2(2)}(E)$  は、下記の式(157)である。

【数 1 1 8】

$$\begin{aligned}
\zeta_r^{2(2)}(E) &= 2\Delta_p^{(2)} + \frac{N\Omega_n^2 d^2 \langle R_r^2(E) \rangle^{(1)}}{2 dE^2} + \frac{3\mu N\Omega_n^2 d \langle R_r^2(E) \rangle^{(1)}}{2 E dE} + \frac{3(\mu-1)^2 N\Omega_n^2 \langle R_r^2(E) \rangle^{(1)}}{8 E^2} \\
&= 2\Delta_p^{(2)} + \frac{N\Omega_n^2 \langle R_r^2(E) \rangle^{(1)}}{E^2} + 3\mu \frac{N\Omega_n^2 \langle R_r^2(E) \rangle^{(1)}}{E^2} + \frac{3(\mu-1)^2 N\Omega_n^2 \langle R_r^2(E) \rangle^{(1)}}{8 E^2} \\
&= 2\Delta_p^{(2)} + \frac{3\mu^2 + 18\mu + 11}{8} \xi_1 \frac{\langle R_r^2(E) \rangle^{(1)}}{\langle R(E) \rangle}
\end{aligned}$$

・・・(157)

つまり、 $r^{2(2)}(E)$  は、エネルギー E に比例する。

【0 1 1 7】

この式(157)を式(156)に代入して計算すると、下記の式(158)となる。

【数 1 1 9】

$$\begin{aligned}
\Delta_r^{2(2)} &= \left[ \langle R(E') \rangle N \zeta_r^{2(2)}(E') \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s1} \frac{3\mu}{2}} \right]_0^E - \int_0^E \langle R(E') \rangle \frac{d}{dE'} \left[ N \zeta_r^{2(2)}(E') \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s1} \frac{3\mu}{2}} \right] dE' \\
&= \langle R(E) \rangle N \zeta_r^{2(2)}(E) - \frac{r_{s1} \frac{3\mu}{2} + 1}{r_{s1} \frac{3\mu}{2} + 2} \int_0^E \langle R(E') \rangle N \zeta_r^{2(2)}(E') \frac{d}{dE'} \left( \frac{E'}{E} \right)^{r_{s1} \frac{3\mu}{2}} dE' \\
&= \frac{1}{r_{s1} \frac{3\mu}{2} + 2} \left[ 2\Delta_p^{(2)} \langle R(E) \rangle + \frac{3\mu^2 + 18\mu + 11}{8} \xi_1 \langle R_r^2(E) \rangle^{(1)} \right] \quad 10 \\
&\quad \dots (158)
\end{aligned}$$

【0 1 1 8】

(C-2) :  $E_1 < E = E_2$  の場合、1次の項  $R_r^2(E)^{(1)}$  は下記の式(159)となる。

【数 1 2 0】

$$\begin{aligned}
\langle R_r^2(E) \rangle^{(1)} &= \frac{1}{N} \int_0^{E_1} \frac{1}{S_n + S_e} 2 \langle R_p(E') \rangle^{(1)} \left( \frac{E'}{E_1} \right)^{r_{s1} \frac{3\mu}{2}} \left( \frac{E_1}{E} \right)^{r_{s2} \frac{3\mu}{2}} dE' \quad 20 \\
&\quad + \frac{1}{N} \int_{E_1}^E \frac{1}{S_n + S_e} 2 \langle R_p(E') \rangle^{(1)} \left( \frac{E'}{E_1} \right)^{r_{s2} \frac{3\mu}{2}} dE' \\
&= \langle R_r^2(E_1) \rangle^{(1)} \left( \frac{E_1}{E} \right)^{r_{s2} \frac{3\mu}{2}} \\
&\quad + \left[ \langle R(E') \rangle 2 \langle R_p(E') \rangle^{(1)} \left( \frac{E'}{E_1} \right)^{r_{s2} \frac{3\mu}{2}} \right]_{E_1}^E - \int_{E_1}^E \langle R(E') \rangle \frac{d}{dE'} \left[ 2 \langle R_p(E') \rangle^{(1)} \left( \frac{E'}{E_1} \right)^{r_{s2} \frac{3\mu}{2}} \right] dE' \quad 30 \\
&= \langle R_r^2(E_1) \rangle^{(1)} \left( \frac{E_1}{E} \right)^{r_{s2} \frac{3\mu}{2}} \\
&\quad + \frac{2}{r_{s2} \frac{3\mu}{2} + 2} \left[ \langle R_p(E) \rangle^{(1)} \langle R(E) \rangle - \langle R_p(E_1) \rangle^{(1)} \langle R(E_1) \rangle \left( \frac{E_1}{E} \right)^{r_{s2} \frac{3\mu}{2}} \right] \\
&\quad \dots (159)
\end{aligned}$$

【0 1 1 9】

また、2次の摂動項  $R_r^2(E)^{(2)}$  は、下記の式(160)となる。

【数 1 2 1】

$$\begin{aligned}
\Delta_r^{2(2)} &= \Delta_r^{2(2)}(E_1) \left( \frac{E_1}{E} \right)^{r_{s2} \frac{3\mu}{2}} \\
&\quad + \frac{2}{r_{s2} \frac{3\mu}{2} + 2} \left\{ \left[ \Delta_p^{(2)} \langle R(E) \rangle + \frac{3\mu^2 + 18\mu + 11}{16} \xi_2 \langle R_r^2(E) \rangle^{(1)} \right] \right. \\
&\quad \quad \left. - \left[ \Delta_p^{(2)} \langle R(E_1) \rangle + \frac{3\mu^2 + 18\mu + 11}{16} \xi_2 \langle R_r^2(E_1) \rangle^{(1)} \right] \left( \frac{E_1}{E} \right)^{r_{s2} \frac{3\mu}{2}} \right\} \\
&\quad \dots (160) \quad 40
\end{aligned}$$

【0 1 2 0】

50

(C-3) :  $E_2 < E_h$  の場合、1次の項  $R_r^2(E)^{(1)}$  は下記の式(161)となる。

【数122】

$$\begin{aligned} \langle R_r^2(E) \rangle^{(1)} &= \langle R_r^2(E_2) \rangle^{(1)} \left( \frac{E_2}{E} \right)^{r_{s3} \frac{3\mu}{2}} \\ &+ \frac{2}{r_{s3} \frac{3\mu}{2} + 2} \left[ \langle R(E) \rangle \langle R_p(E) \rangle^{(1)} - \langle R(E_2) \rangle \langle R_p(E_2) \rangle^{(1)} \left( \frac{E_2}{E} \right)^{r_{s3} \frac{3\mu}{2}} \right] \end{aligned} \quad \dots (161)$$

10

【0121】

また、2次の摂動項  $r^2(2)$  は、下記の式(162)となる。

【数123】

$$\begin{aligned} \Delta_r^{2(2)}(E) &= \Delta_r^{2(2)}(E_2) \left( \frac{E_2}{E} \right)^{r_{s3} \frac{3\mu}{2}} \\ &+ \frac{2}{r_{s3} \frac{3\mu}{2} + 2} \left\{ \left[ \Delta_p^{(2)} \langle R(E) \rangle + \frac{3\mu^2 + 18\mu + 11}{16} \xi_3 \langle R_r^2(E) \rangle^{(1)} \right] \right. \\ &\quad \left. - \left[ \Delta_p^{(2)} \langle R(E_2) \rangle + \frac{3\mu^2 + 18\mu + 11}{16} \xi_3 \langle R_r^2(E_2) \rangle^{(1)} \right] \left( \frac{E_2}{E} \right)^{r_{s3} \frac{3\mu}{2}} \right\} \end{aligned} \quad \dots (162)$$

20

【0122】

(C-4) :  $E > E_h$  の場合、1次の項  $R_r^2(E)^{(1)}$  は下記の式(163)となる。

【数124】

$$\langle R_r^2(E) \rangle^{(1)} = \langle R_r^2(E_h) \rangle^{(1)} + [\langle R(E) \rangle - \langle R(E_h) \rangle]^2 \quad \dots (163)$$

30

【0123】

また、2次の摂動項  $r^2(2)$  は、

$$r^2(2) = r^2(2)(E_h) \quad \dots (164)$$

となる。

【0124】

以上の説明では、説明を簡単にするために、エネルギー領域を  $E_1$ ,  $E_2 = 5E_1$ ,  $E_h = 10E_1$  と4つに区切ってモデルを導出し、それで十分な精度のモデル式になっていることをみてきた。モデルの導出過程をみると、更に細かく領域を分割して精度を上げることも、荒く分割しておおまかな情報を得ることもできるように一般化しておく。

40

【0125】

図4は、モデル式を一般化する場合のエネルギー区分の概念的説明図であり、エネルギー領域は、

$$E_{1,j} = f_j \times E_1 \quad \dots (165)$$

で分離する。 $f_j$  は自然数である必要はないが、 $j$  に関して単調増加する数であるとする。ここで

$$E_{1,0} = f_0 \times E_1 = 0 \quad \dots (166)$$

つまり、 $f_0 = 0$  とし、また、電子阻止能が支配的になるとする境界のエネルギー  $E_{1,h}$  はここでは

50

$$E_{1,h} = f_h \times E_1 \quad \dots (167)$$

と表現しなおす。

【0126】

モデルの導出の際には  $f_h = 10$  としていたが、これは任意の値を設定できる。この電子阻止能が支配的な領域では、

$$r_s = 0 \quad \dots (168)$$

とする。すると上述の各モーメントパラメータは以下のように全エネルギー領域で一般的な表現で記述できる。

【数125】

$$\langle R_p(E) \rangle^{(1)} = \langle R_p(E_{1_{(j-1)}}) \rangle^{(1)} \left( \frac{E_{1_{(j-1)}}}{E} \right)^{r_{sj} \frac{\mu}{2}} + \frac{1}{r_{sj} \frac{\mu}{2} + 1} \left[ \langle R(E) \rangle - \langle R(E_{1_{(j-1)}}) \rangle \left( \frac{E_{1_{(j-1)}}}{E} \right)^{r_{sj} \frac{\mu}{2}} \right] \quad \dots (169)$$

$$\Delta_p^{(2)}(E) = \Delta_p^{(2)}(E_{1_{(j-1)}}) \left( \frac{E_{1_{(j-1)}}}{E} \right)^{r_{sj} \frac{\mu}{2}} + \frac{1}{r_{sj} \frac{\mu}{2} + 1} \frac{2\mu + 1}{8} \xi_j \left[ \langle R(E) \rangle - \langle R(E_{1_{(j-1)}}) \rangle \left( \frac{E_{1_{(j-1)}}}{E} \right)^{r_{sj} \frac{\mu}{2}} \right] \quad \dots (170)$$

$$\langle R_c^2(E) \rangle^{(1)} = \langle R_c^2(E_{1_{(j-1)}}) \rangle^{(1)} + \left[ \langle R_p(E) \rangle^{(1)} \langle R(E) \rangle - \langle R_p(E_{1_{(j-1)}}) \rangle^{(1)} \langle R(E_{1_{(j-1)}}) \rangle \right] \quad \dots (171)$$

$$\Delta_c^{2(2)}(E) = \Delta_c^{2(2)}(E_{1_{(j-1)}}) + \left\{ \left[ \Delta_p^{(2)}(E) \langle R(E) \rangle + \frac{\xi_j}{2} \langle R_c^2(E) \rangle^{(1)} \right] - \left[ \Delta_p^{(2)}(E_{1_{(j-1)}}) \langle R(E_{1_{(j-1)}}) \rangle + \frac{\xi_j}{2} \langle R_c^2(E_{1_{(j-1)}}) \rangle^{(1)} \right] \right\} \quad \dots (172)$$

$$\langle R_r^2(E) \rangle^{(1)} = \langle R_r^2(E_{1_{(j-1)}}) \rangle^{(1)} \left( \frac{E_{1_{(j-1)}}}{E} \right)^{r_{sj} \frac{3\mu}{2}} + \frac{2}{r_{sj} \frac{3\mu}{2} + 2} \left[ \langle R_p(E) \rangle^{(1)} \langle R(E) \rangle - \langle R_p(E_{1_{(j-1)}}) \rangle^{(1)} \langle R(E_{1_{(j-1)}}) \rangle \left( \frac{E_{1_{(j-1)}}}{E} \right)^{r_{sh} \frac{3\mu}{2}} \right] \quad \dots (173)$$

$$\Delta_r^{2(2)}(E) = \Delta_r^{2(2)}(E_{1_{(j-1)}}) \left( \frac{E_{1_{(j-1)}}}{E} \right)^{r_{sj} \frac{3\mu}{2}} + \frac{2}{r_{sj} \frac{3\mu}{2} + 2} \left\{ \left[ \Delta_p^{(2)}(E) \langle R(E) \rangle + \xi_j \frac{3\mu^2 + 18\mu + 11}{16} \langle R_r^2(E) \rangle^{(1)} \right] - \left[ \Delta_p^{(2)}(E_{1_{(j-1)}}) \langle R(E_{1_{(j-1)}}) \rangle + \xi_j \frac{3\mu^2 + 18\mu + 11}{16} \langle R_r^2(E_{1_{(j-1)}}) \rangle^{(1)} \left( \frac{E_{1_{(j-1)}}}{E} \right)^{r_{sh} \frac{3\mu}{2}} \right] \right\} \quad \dots (174)$$

【実施例1】

【0127】

10

20

30

40

50

以上を前提として、ここで、図5乃至図9を参照して、本発明の実施例1のイオン注入分布発生方法を説明する。図5は、本発明の実施例1のイオン注入分布発生方法のフローチャートであり、まず、

- a. 基板種、注入不純物種、注入エネルギー、及び、ドーズ量からなる注入条件を入力する。次いで、上記の式(129)乃至式(164)で説明したように、
- b. 簡略化した2次の摂動モデルを用いて1次のモーメントである飛程の射影 $R_p$ と、2次のモーメントである射影 $R_p$ のストラッグル $R_p$ 及び横方向のストラッグル $R_{p,t}$ を求める。次いで、
- c. 求めた $R_p$ と $R_p$ から1次元分布のガウス分布を発生させるとともに、 $R_p$ 、 $R_p$ 及び $R_{p,t}$ から2次元のガウス分布を発生させる。

10

【0128】

図6は、本発明の実施例1のイオン注入分布発生方法により求めたアモルファスSi中のP濃度分布図であり、SIMS及び他のモデルと比較したものである。図から明らかのように、2次の拡張LSS理論(E2LSS)は実験データであるSIMSを良く再現している。また、本発明のモデルもSIMSをほぼ再現できている。

【0129】

但し、本発明のモデルでは、3次のモーメントを $=0$ としているので、分布の非対称性が表現できない。本発明のモデルと2次の拡張LSS理論(E2LSS)の違いはこの $=0$ の違いに起因し、ここで扱っている $R_p$ と $R_p$ に関しては両モデルの一致が良いことが後で示される。なお、Lindhardのモデルはピーク位置は合っているが、幅、即ち、 $R_p$ が大分大きくなっている。

20

【0130】

以上の結果から、E2LSSは実験データを良く再現していることが分かる。より、広汎なデータに対しても良く一致することが示されているので、そこで、E2LSSの各パラメータとの比較で本発明のモデルの精度を評価する。なお、ここでは、50keV以下の比較的エネルギーの低い領域と、カバーしようとしている最大値1MeVまでの高エネルギー領域の2つの場合について見ていく。

【0131】

図7は、Bのイオン注入パラメータとE2LSSの結果との比較図であり、図7(a)は50keV以下の場合を示し、図7(b)は1MeVまでの広いエネルギー範囲についての結果を示している。なお、区分した各エネルギー領域における $r_s$ 及び $r_s$ の値は図に示しており、後述するP及びAsの場合も同様である。なお、ここでは、 $r_{s1} = 0.9$ 、 $r_{s2} = 0.4$ 、 $r_{s3} = 0.2$ 、 $r_1 = 0.65$ 、 $r_2 = 0.30$ 、 $r_3 = 0.05$ としている。

30

【0132】

図7(a)に示すように、50keV以下で本発明のモデルは、 $R_p$ 、 $R_p$ 、 $R_{p,t}$ とともにE2LSSの結果とよく一致している。なお、図7に併せて表示しているLindhardのモデル式は $R_p$ は小さめ、 $R_p$ は大きめになっている。このモデルは核阻止能が支配的と仮定しているため、Bの場合の $E_1 = 7V$ 以下では比較的精度が高い。

40

【0133】

また、本発明のモデルは、図7(b)に示すように、1MeVまでほぼE2LSSの結果を再現できている。一方、Lindhardのモデルは、核阻止能が支配的でないこのような領域では大分精度が落ちることが分かる。

【0134】

図8は、Pのイオン注入パラメータとE2LSSの結果との比較図であり、図8(a)は50keV以下の場合を示し、図8(b)は1MeVまでの広いエネルギー範囲についての結果を示している。図8(a)に示すように、50keV以下で本発明のモデルは、 $R_p$ 、 $R_p$ 、 $R_{p,t}$ とともにE2LSSの結果とよく一致している。なお、 $R_p$ は大きめになっているが、Bの場合より良い。

【0135】

50

また、本発明のモデルは、図 8 ( b ) に示すように、1 MeV までほぼ E 2 L S S の結果を再現できている。一方、L i n d h a r d のモデルは、B の場合と同様に、低エネルギー領域より大分精度が落ちることが分かる。

【 0 1 3 6 】

図 9 は、A s のイオン注入パラメータと E 2 L S S の結果との比較図であり、図 9 ( a ) は 5 0 k e V 以下の場合を示し、図 9 ( b ) は 1 M e V までの広いエネルギー範囲についての結果を示している。図 9 ( a ) に示すように、 $R_p$  に関しては本発明のモデルは、L i n d h a r d のモデルともほぼ E 2 L S S のデータを再現しているが、全体的に大きめに予想している。 $R_p$  ,  $R_{p t}$  とともに E 2 L S S の結果をほぼ再現しているが全体に小さめである。L i n d h a r d のモデル式  $R_p$  は大きめになっている。

10

【 0 1 3 7 】

また、本発明のモデルは、図 9 ( b ) に示すように、1 MeV までほぼ E 2 L S S の結果を再現できている。一方、L i n d h a r d のモデルの  $R_p$  モデルはこの場合は精度が高い。A s の場合は  $E_1$  が 6 0 0 k e V 程度のため、核阻止能が支配的という近似が有効なためである。L i n d h a r d の  $R_p$  に対するモデルはこの場合でも大き目となっている。

【 実施例 2 】

【 0 1 3 8 】

次に、図 1 0 乃至図 1 3 を参照して、さらなる簡易モデルに関する本発明の実施例 2 のイオン注入分布発生方法を説明する。ここでは、2 次の拡張モデルを単純化してモデルを導出した。1 次のモデルでは精度が  $R_p$  の精度が悪いことが指摘されているからである。ここでは、簡易モデルでその精度とオーダーの関係を解析をしていく。

20

【 0 1 3 9 】

図 1 0 乃至図 1 2 に 2 次の拡張 L S S 理論と 1 次の簡易 L S S 理論の比較を示す。図 1 0 は、B の  $R_p$  ,  $R_{p t}$  のエネルギー依存性の説明図であり、図 1 0 ( a ) は 5 0 k e V 以下の場合を示し、図 1 0 ( b ) は 1 M e V までの広いエネルギー範囲についての結果を示している。図 1 0 ( a ) 及び ( b ) に示すように B の場合は  $R_p$  ,  $R_{p t}$  とともに精度が高い。なお、ここでも、 $r_{s 1} = 0.9$  ,  $r_{s 2} = 0.4$  ,  $r_{s 3} = 0.2$  としている。

【 0 1 4 0 】

図 1 1 は、P の  $R_p$  ,  $R_{p t}$  のエネルギー依存性の説明図であり、図 1 1 ( a ) は 5 0 k e V 以下の場合を示し、図 1 1 ( b ) は 1 M e V までの広いエネルギー範囲についての結果を示している。図 1 1 ( a ) 及び ( b ) に示すように P の場合は  $R_p$  ,  $R_{p t}$  の精度は高いが、 $R_p$  は大分小さくなる。

30

【 0 1 4 1 】

図 1 2 は、A s の  $R_p$  ,  $R_{p t}$  のエネルギー依存性の説明図であり、図 1 2 ( a ) は 5 0 k e V 以下の場合を示し、図 1 2 ( b ) は 1 M e V までの広いエネルギー範囲についての結果を示している。図 1 2 ( a ) 及び ( b ) に示すように A s の場合も  $R_p$  ,  $R_{p t}$  の精度は高いが、 $R_p$  は大分小さくなり、P の場合より精度が悪くなる傾向を示している。

40

【 0 1 4 2 】

ここで、 $E < E_1$  の低エネルギー領域における 1 次簡易モデルの各モーメントを具体的に書き下すと、下記の式 ( 1 7 5 ) 乃至式 ( 1 7 7 ) で表される。

【数 1 2 6】

$$\langle R_p(E) \rangle = \left[ \frac{1}{r_{s1} \frac{\mu}{2} + 1} + \xi_1 \frac{2\mu + 1}{2(r_{s1}\mu + 2)^2} \right] \langle R(E) \rangle \quad \dots (175)$$

$$\langle \Delta R_p^2(E) \rangle = \left[ \frac{r_{s1}^2 \mu^2}{(3r_{s1}\mu + 4)(r_{s1}\mu + 2)} + \xi_1 \frac{A\mu^4 + B\mu^3 + C\mu^2 + D\mu + 128}{4(3r_{s1}\mu + 4)^2(r_{s1}\mu + 2)^2} \right] \frac{1}{r_{s1} \frac{\mu}{2} + 1} \langle R(E) \rangle^2 \quad \dots (176)$$

10

$$\begin{aligned} A &= 6r_{s1}^4 + 6r_{s1}^3 + 8r_{s1}^2 \\ B &= 43r_{s1}^3 + 20r_{s1}^2 + 32r_{s1} \\ C &= 114r_{s1}^2 + 96r_{s1} + 32 \\ D &= 176r_{s1} + 128 \end{aligned}$$

$$\langle \Delta R_{pt}^2(E) \rangle = \left[ \frac{r_{s1}\mu}{3r_{s1}\mu + 4} + \xi_1 \frac{E\mu^3 + F\mu^2 + G\mu - 8}{4(3r_{s1}\mu + 4)^2(r_{s1}\mu + 2)} \right] \frac{1}{r_{s1} \frac{\mu}{2} + 1} \langle R(E) \rangle^2 \quad \dots (177)$$

20

$$\begin{aligned} E &= 6r_{s1}^3 + 6r_{s1}^2 - 4r_{s1} \\ F &= 31r_{s1}^2 - 16r_{s1} - 8 \\ G &= 32r_{s1} - 48 \end{aligned}$$

【0 1 4 3】

上記の式(175)乃至式(177)はさらに簡単に下記の(178)乃至式(180)で表現される。

【数 1 2 7】

$$\langle R_p(E) \rangle = f_{Rp}(\mu) \langle R(E) \rangle \quad \dots (178) \quad 30$$

$$\langle \Delta R_p^2(E) \rangle = \sqrt{\langle \Delta R_p^2(E) \rangle} f_{\Delta Rp}(\mu) \langle R(E) \rangle \quad \dots (179)$$

$$\langle \Delta R_{pt}^2(E) \rangle = \sqrt{\langle \Delta R_{pt}^2(E) \rangle} f_{\Delta Rpt}(\mu) \langle R(E) \rangle \quad \dots (180)$$

ここで、各係数 f ( μ ) は対応する式から容易にわかる。

【0 1 4 4】

式(176)に示すように、 $R_p^2(E)$  の1次の項の分母に  $\mu^2$  があるため、 $\mu$  が小さい場合はこれが2次の微量に実効的になり、2次の項と大きさが同程度になることがわかる。このため、 $\mu$  の大きな B では精度が高く、小さな A s では精度が悪くなることが理解される。

40

【0 1 4 5】

これに比較し、式(177)に示すように、 $R_{pt}^2(E)$  では1次の分母は  $\mu$  であり、この場合は実効的に1次の微量であり、2次の項よりは大きさを保っていることが理解される。

【0 1 4 6】

以上をより詳しく解析するため、これらの係数の依存性の1次と2次近似の比較を図13に示す。図13は、各係数の  $\mu$  依存性の説明図であり、図13(a)は  $R_p$  に関する係数の  $\mu$  依存性の説明図であり、図13(b)は  $R_p$  及び  $R_{pt}$  に関する係数の  $\mu$  依存

50

性の説明図である。なお、 $\mu$ は上述のように $\mu = M_1 / M_2$ である。

【0147】

図13(a)に示すように、 $R_p$ においては、式(175)から分かるように1次の項が常に支配的であるため、 $R_p$ は1次近似で充分いい精度が期待できる。

【0148】

また、図13(b)に示すように、 $R_p$ では、1次近似は大きな $\mu$ で精度がよくなっていくが、小さな $\mu$ は半分程度になってしまうことがわかる。これは、前に指摘したように1次の項の $\mu$ の最低次数が $\mu^2$ であることに起因する。また、同じく図13(b)に示すように、 $R_{pt}(E)$ では、 $R_p$ と異なり、 $\mu$ の最低次数が $\mu$ であることに起因して、全ての $\mu$ において1次近似の精度が高い。

10

【0149】

この図13(b)から明らかなように、 $R_p$ と $R_{pt}$ は $\mu \sim 1.5$ を境に大小が逆転する。しかしながら、両者はほぼ等しいと見做して良い。これは $R_p$ の周りで全方散乱が起きていると近似できることを意味する。したがって、

$R_p$ と $R_{pt}$ と近似すれば、1次の項のみでモーメントが記述できる。

【0150】

即ち、 $E < E_1$ のエネルギー範囲では、各モーメントは、下記の式(181)及び式(182)となる。この扱いは、低エネルギー領域のみならず、高エネルギー領域でも良い近似になっている。

20

【数128】

$$\langle R_p(E) \rangle = \frac{1}{r_{sl} \frac{\mu}{2} + 1} \langle R(E) \rangle \dots (181)$$

$$\langle \Delta R_p(E) \rangle = \langle \Delta R_{pt}(E) \rangle = \sqrt{\frac{1}{r_{sl} \frac{\mu}{2} + 1} \frac{r_{sl} \mu}{3r_{sl} \mu + 4}} \langle R(E) \rangle \dots (182)$$

【実施例3】

30

【0151】

次に、イオン濃度分布に関する本発明の実施例3を説明する。本発明者等は、 $x$ を基板の深さ方向、 $J_{chan}$ を注入するイオンのドーズ量、 $J_{chan}$ をチャネルドーズ量、 $n_a(x)$ を非晶質パートの分布関数、 $n_c(x)$ をチャンネルリングパートの分布関数とすると、下記の式で表されるテール関数 $N(x)$ からイオン注入分布を発生させる際に、非晶質層中のイオン分布から抽出したモーメントパラメータ、イオンの飛程の注入方向の射影を表すパラメータ $R_p$ 、 $R_p$ のストラッグリング $R_p$ 、注入イオン分布の左右非対称性を表すパラメータ $\gamma$ 、注入イオン分布のピークの鋭さを表すパラメータ $\alpha$ を前記テール関数の $R_p$ 、 $R_p$ 、 $\gamma$ 、 $\alpha$ として用いるイオン注入分布発生方法を提案している(必要ならば、特願2008-059070参照)。

40

$$N(x) = (J_{non} + J_{chan}) n_a(x) + J_{chan} n_c(x)$$

但し、 $n_a(x)$ 及び $n_c(x)$ は、 $h_{ma}(x)$ 、 $h_{mc}(x)$ を前記の同じモーメントパラメータ $R_p$ 、 $R_p$ 、 $\gamma$ を持つピアソン関数、 $x_T = R_p + R_p$ を比例係数とした場合に、

$$n_p(x) = h_{ma}(x)$$

$$n_c(x) = h_{mc}(x) : x < x_T$$

$$n_c(x) = [h_{mc}(x) + h_{Tc}(x)] : x > x_T$$

で表され、且つ、ピーク濃度位置を $x_{pc}$ 、 $L$ をイオン注入分布のテールの広がりを表すパラメータ、 $\alpha$ (なお、 $h_{Tc}(x)$ においては便宜的に $a$ を用いる)をイオン注入分布のテールの広がり形状を表すパラメータ、 $\gamma$ を係数とすると、

50

$$h_{Tc}(x) = h_{mc}(x_{pc}) \exp\{- (\ln) [(x - x_{pc})^a / L]\}$$

【0152】

ここで、3次のモーメント及び4次のモーメントを0として、2次のモーメントまでを用いたテール関数 $N(x)$ において、テール関数 $N(x)$ のアモルファスパートの分布関数 $n_a(x)$ を、上記の実施例2で求めた1次の項のみのモーメントで記述される $R_p(E)$ 、 $R_p(E)$ 及び $R_{pt}(E)$ を用いて表すことによって、容易に不純物濃度分布をGauss分布として表すことができる。

【0153】

ここで、実施例1乃至実施例3を含む本発明の実施の形態に関して、以下の付記を開示する。

10

(付記1) エネルギーEで半導体に注入するイオンの飛程Rの射影 $R_p$ の2次の項まで考慮した射影 $R_p(E)^{(2)}$ を、1次の項まで考慮した既知の射影を $R_p(E)^{(1)}$ とした時に、摂動項 $p^{(2)}(E)$ を用いて、

$$R_p(E)^{(2)} = R_p(E)^{(1)} + p^{(2)}(E)$$

とした近似式を用いた2次の摂動モデルを用いて求める際に、全阻止能 $(S_n + S_e)$ に対する核阻止能 $S_n$ の比 $r = S_n / (S_n + S_e)$ を複数のエネルギー領域で区分し、前記区分した各エネルギー領域で前記 $r$ を定数 $r_s$ として扱うことを特徴とするイオン注入分布発生方法。

(付記2) 前記半導体に注入するイオンの飛程Rの射影 $R_p$ の2次の項まで考慮した偏差 $R_p(E)^{(2)}$ を、2次の項まで考慮した既知の飛程 $R_p$ の横方向広がりを $R_T^2(E)^{(2)}$ とした時、

20

$$R_c^2(E) = R_p^2(E) + R_T^2(E) \text{、及び、}$$

$$R_r^2(E) = R_p^2(E) - R_T^2(E) / 2$$

で定義される、 $R_c^2(E)$ 及び $R_r^2(E)$ を用い、それぞれ、1次の項まで考慮した既知の $R_c^2(E)^{(1)}$ 、 $R_r^2(E)^{(1)}$ 、摂動項 $c^{2(2)}(E)$ 及び摂動項 $r^{2(2)}(E)$ を用いて、

$$R_c^2(E)^{(2)} = R_c^2(E)^{(1)} + c^{2(2)}(E) \text{、及び、}$$

$$R_r^2(E)^{(2)} = R_r^2(E)^{(1)} + r^{2(2)}(E)$$

と近似した $R_c^2(E)^{(2)}$ 、 $R_r^2(E)^{(2)}$ と前記 $R_p^2(E)^{(2)}$ を用いて

30

$$R_p^2(E)^{(2)} = \{ R_c^2(E)^{(2)} + 2 R_r^2(E)^{(2)} \} / 3 - R_p^2(E)^{(2)}$$

とした近似式を用いた2次の摂動モデルを用いて求める際に、全阻止能 $(S_n + S_e)$ に対する核阻止能 $S_n$ の比 $r = S_n / (S_n + S_e)$ を複数のエネルギー領域で区分し、前記区分した各エネルギー領域で前記 $r$ を定数 $r_s$ として扱うことを特徴とする請求項1記載のイオン注入分布発生方法。

(付記3) 前記区分するエネルギー領域を、電子阻止能 $S_e$ と核阻止能 $S_n$ とが一致するエネルギーで規格化することを特徴とする請求項1または2に記載のイオン注入分布発生方法。

(付記4) エネルギーストラッグリング $n^2(E)$ を、飛程 $R(E)$ で結び付けることを特徴とする請求項1乃至3のいずれか1に記載のイオン注入分布発生方法。

40

(付記5) 前記エネルギーストラッグリング $n^2(E)$ を、飛程 $R(E)$ で結び付ける際のフィッティングパラメータも前記エネルギー領域で区分し、前記区分した各エネルギー領域で前記 $n$ を定数 $n_s$ として扱うことを特徴とする請求項1乃至4のいずれか1に記載のイオン注入分布発生方法。

(付記6) 前記飛程 $R(E)$ が、エネルギーEに比例する領域と、エネルギーの平方根に比例する領域に区分して計算を行うことを特徴とする請求項1乃至5のいずれか1に記載のイオン注入分布発生方法。

(付記7) 前記 $R_p(E)^{(2)}$ として、 $R_p(E)^{(1)}$ の近似式を用いることを特徴とする請求項1乃至6のいずれか1に記載のイオン注入分布発生方法。

50

(付記 8) 前記射影  $R_p$  のストラッグリング  $R_p(E)^{(2)}$  及び横方向のストラッグリング  $R_{pt}(E)^{(2)}$  として、 $R_{pt}(E)^{(1)}$  の近似式を用いることを特徴とする請求項 7 記載のイオン注入分布発生方法。

(付記 9) 請求項 1 乃至 8 のいずれか 1 に記載のイオン注入分布発生方法により求めた  $R_p(E)^{(2)}$  及び  $R_{pt}(E)^{(2)}$  を用いてイオン注入分布をガウス分布として発生させることを特徴とするシミュレータ。

(付記 10) 請求項 1 乃至 8 のいずれか 1 に記載のイオン注入分布発生方法により求めた  $R_p(E)^{(2)}$ 、 $R_{pt}(E)^{(2)}$  及び  $R_{pt}(E)^{(2)}$  を用いて二次元濃度分布を発生させることを特徴とするシミュレータ。

【図面の簡単な説明】

10

【0154】

【図 1】注入されたイオンの飛程  $R$  の入射エネルギー  $E$  依存性の説明図である。

【図 2】エネルギー領域区分の説明図である。

【図 3】 $I_4 / I_2$  のユニバーサルエネルギー依存性の説明図及び各不純物のユニバーサルエネルギーと規格化エネルギー  $E / E_1$  との相関図である。

【図 4】モデル式を一般化する場合のエネルギー区分の概念的説明図である。

【図 5】本発明の実施例 1 のイオン注入分布発生方法のフローチャートである。

【図 6】本発明の実施例 1 のイオン注入分布発生方法により求めたアモルファス  $S_i$  中の  $P$  濃度分布図である。

【図 7】 $B$  のイオン注入パラメータと  $E_2 L S S$  の結果との比較図である。

20

【図 8】 $P$  のイオン注入パラメータと  $E_2 L S S$  の結果との比較図である。

【図 9】 $A_s$  のイオン注入パラメータと  $E_2 L S S$  の結果との比較図である。

【図 10】1 次簡易近似の  $B$  の  $R_p$ 、 $R_p$ 、 $R_{pt}$  のエネルギー依存性の説明図である。

【図 11】1 次簡易近似の  $P$  の  $R_p$ 、 $R_p$ 、 $R_{pt}$  のエネルギー依存性の説明図である。

【図 12】1 次簡易近似の  $A_s$  の  $R_p$ 、 $R_p$ 、 $R_{pt}$  のエネルギー依存性の説明図である。

【図 13】各係数の  $\mu$  依存性の説明図である。

【図 14】計算モデルである。

30

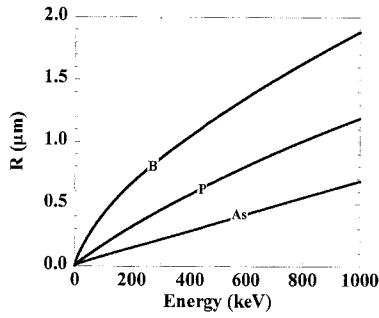
【図 15】イオンの飛程  $R$  の模式図である。

【図 16】 $R_p(E, \cos \theta)$ 、 $R_T(E, \cos \theta)$ 、 $R_p(E)$ 、 $R_T(E)$  の幾何学的関係の説明図である。

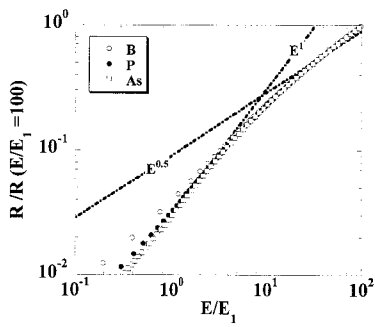
【 図 1 】

注入されたイオンの飛程Rの入射エネルギーE依存性の説明図

(a)

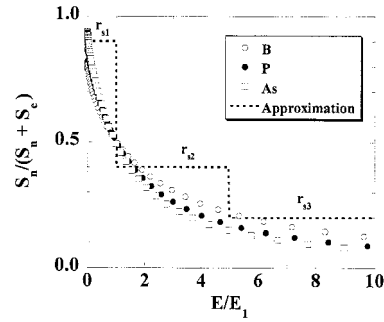


(b)



【 図 2 】

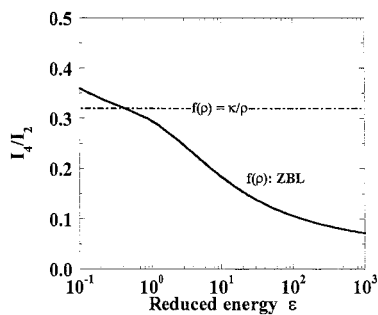
エネルギー領域区分の説明図



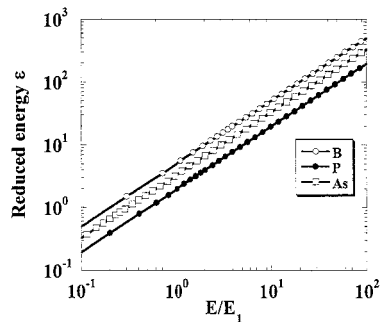
【 図 3 】

$I_4/I_2$ のユニバーサルエネルギー $\epsilon$ 依存性の説明図及び各不純物のユニバーサルエネルギー $\epsilon$ と規格化エネルギー $E/E_1$ との相関図

(a)

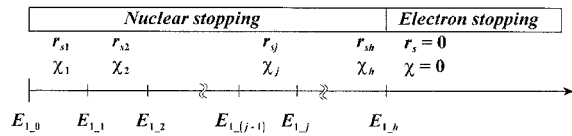


(b)



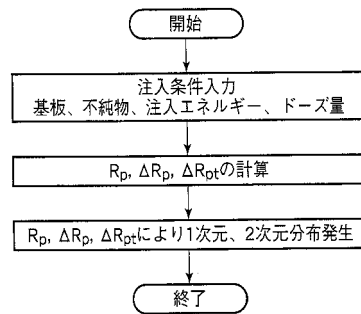
【 図 4 】

モデル式を一般化する場合のエネルギー区分の概念的説明図



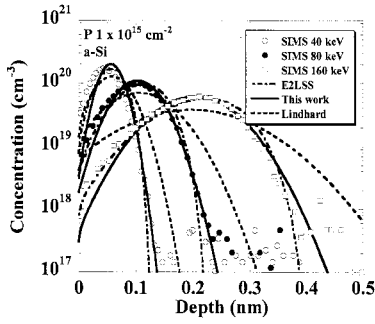
【 図 5 】

本発明の実施例1のイオン注入分布発生方法のフローチャート



【 図 6 】

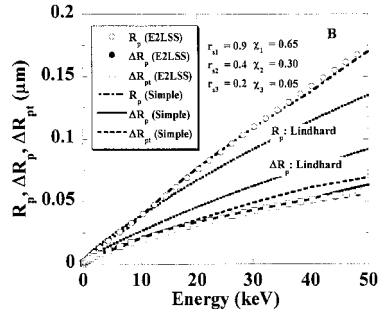
本発明の実施例1のイオン注入分布発生方法により求めたアモルファスSi中のP濃度分布図



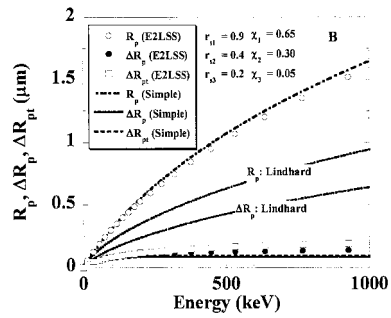
【 図 7 】

Bのイオン注入パラメータとE2LSSの結果との比較図

(a)



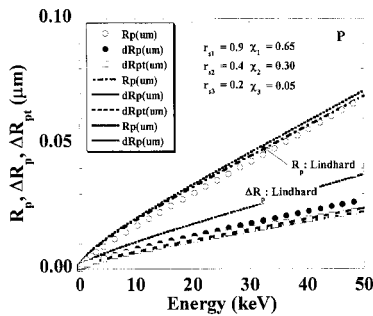
(b)



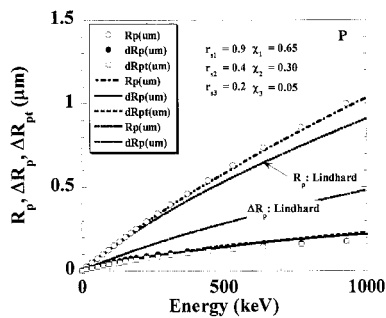
【 図 8 】

Pのイオン注入パラメータとE2LSSの結果との比較図

(a)



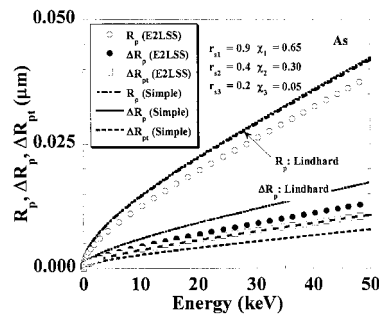
(b)



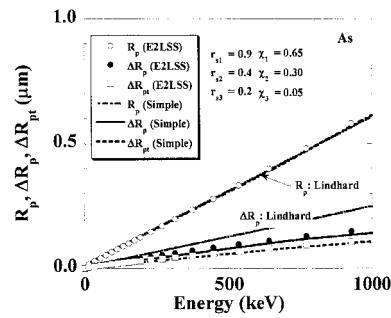
【 図 9 】

Asのイオン注入パラメータとE2LSSの結果との比較図

(a)



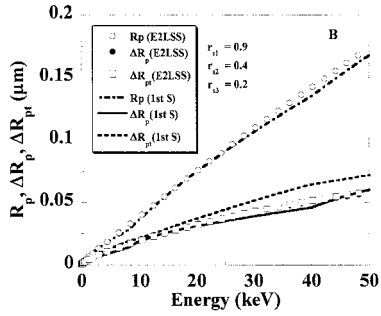
(b)



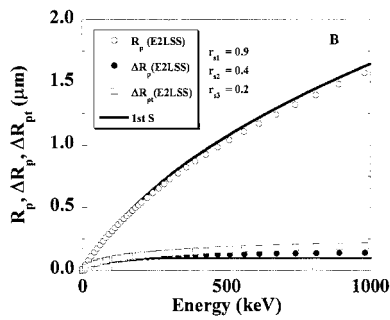
【 図 1 0 】

Bの $R_p$ ,  $\Delta R_p$ ,  $\Delta R_{pt}$ のエネルギー依存性の説明図

(a)



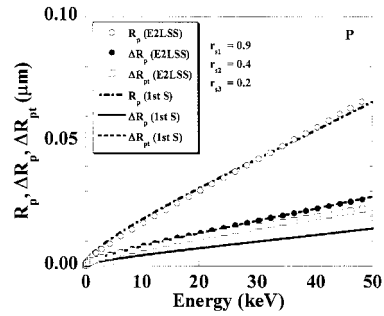
(b)



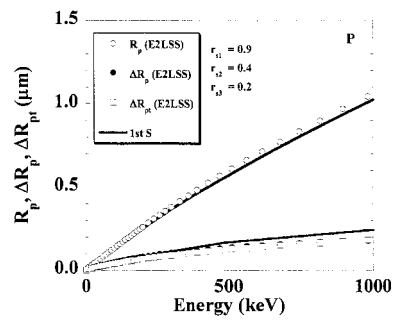
【 図 1 1 】

Pの $R_p$ ,  $\Delta R_p$ ,  $\Delta R_{pt}$ のエネルギー依存性の説明図

(a)



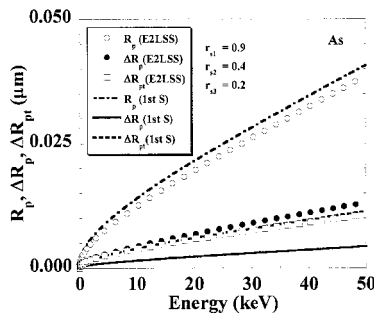
(b)



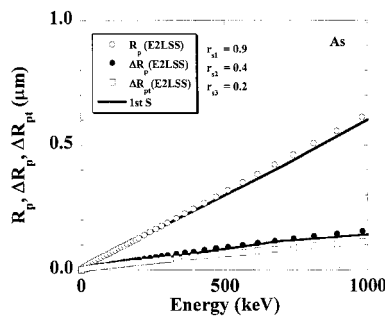
【 図 1 2 】

Asの $R_p$ ,  $\Delta R_p$ ,  $\Delta R_{pt}$ のエネルギー依存性の説明図

(a)



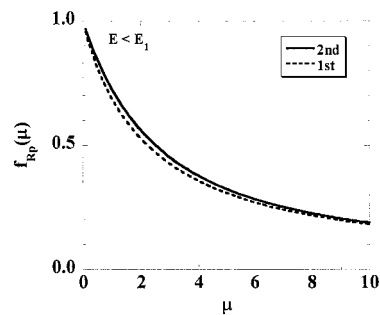
(b)



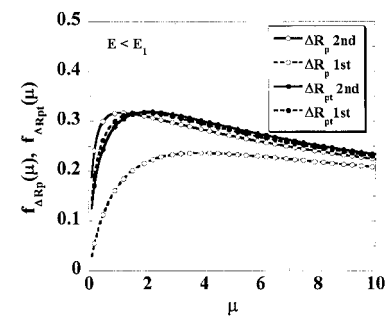
【 図 1 3 】

各係数の $\mu$ 依存性の説明図

(a)

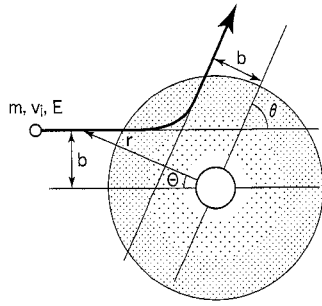


(b)



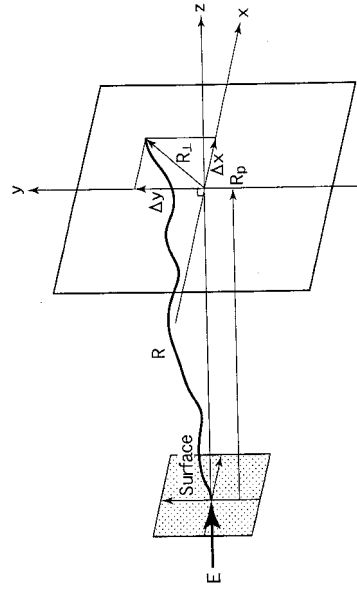
【 図 1 4 】

計算モデル



【 図 1 5 】

イオンの飛程Rの模式図



【 図 1 6 】

$R_p(E, \cos \phi)$ ,  $R_T(E, \cos \phi)$ ,  $R_p(E)$ ,  $R_T(E)$  の幾何学的関係の説明図

