

# 卒業研究報告

題目

## Au-Cu 相互拡散の研究 RBS 測定結果のシミュレーション

指導教官

成沢 忠

報告者

足達 拓郎

平成 13 年 2 月 24 日

高知工科大学 電子・光システム工学科

## 目次

- 1 . はじめに
  - 1 - 1 . 動機
  - 1 - 2 . 拡散とは
  - 1 - 3 . R B S の説明
- 2 . 実験方法
- 3 . R B S 理論
- 4 . シミュレーションについて
- 5 . 結果
- 6 . 考察
- 7 . まとめ
- 8 . 参考文献
- 9 . 謝辞

## 1 . はじめに

### 1 - 1 . 動機

近年、発達している産業の一つに半導体産業がある。大学生活を終えるにあたり、少しでも人に知られているようなものを研究のテーマにしようと思い、この半導体工学に関係する拡散についての研究を行うことにした。この研究では、RBS装置を用いて得られたAu - Cu拡散の試料データにシミュレーションをおこなうことで試料中の元素分布について調べる。

### 1 - 2 . 拡散とは

拡散現象は、多くの粒子からなる系が熱平衡に到達しようとするときに必ずみられる現象である。この研究では、金属の固体同士の間における原子拡散について調べる。ある熱エネルギーを与えられた固体の中では原子の移動が起こる。これが、ある2つの金属によってなる固体の場合には、その2つの金属の原子が混ざり合うというような事が起こるのである。これが、この研究で調べる相互拡散である。

### 1 - 3 . RBSの説明

RBS (ラザフォード後方散乱分光) とは、HやHeイオンなどの軽い高速イオンビームを用いて、その物質の表面より深さ数 $\mu\text{m}$ のところまでの元素組成分布を、約100%の精度で測定する方法である。利点としては、少量(数mm四方で厚さ数 $\mu\text{m}$ 以上でよい)の試料しか必要とせず、それをほとんど破壊することなく、短時間で測定できるということである。手法について述べると、まず、数百万電子ボルトのエネルギーを持つHeイオンを試料に向けて、入射させる。固体中に入射したHeイオンは余分な電子をすべてはぎとられ、 $\text{He}^{++}$ 粒子となって高速( $10^7 \sim 10^8 \text{ cm/s}$ )で運動しながら、固体を構成する電子や原子核と相互作用する。電子は軽いのでイオンに対して弱い制動を与えるだけであるが、重い原子核に接近( $\sim 10^{-12} \text{ cm}$ )したイオンは強いクーロン反発を受けて散乱される。散乱後のイオンのエネルギーは、散乱前のエネルギー、散乱角、ターゲット原子核の質量で決められる。このように一定のエネルギーを持ったイオンビームを試料に入射させ、後方散乱されたイオンのエネルギースペクトルを測定することで、試料を構成する原子の種類とその深さ分布をしることができるのである。

## 2 . 実験方法

研磨 ガスケット (Cu) を適度な大きさ (約 1 cm 四方、厚さ 2 mm) に切断し、コンパウンド (研磨剤) を使って研磨する。

蒸着 蒸着装置を用いて、Cu 基板に Au 薄膜を蒸着させる。

熱処理 サンプルを以下の条件で熱処理する。それと、熱処理をおこなわないサンプルも一つ用意する。

- サンプル A : 400 K 100 s
- サンプル B : 400 K 1000 s
- サンプル C : 400 K 10000 s
- サンプル D : 550 K 100 s
- サンプル E : 550 K 1000 s
- サンプル F : 550 K 10000 s
- サンプル G : 300 K (熱処理をほどこしてないもの)



サンプル写真 写真上サンプルG 写真下、左より順にサンプルA、B、C



サンプル写真 写真上 サンプルG 写真下、左より順にサンプルD , E , F

RBS サンプルをサンプルホルダーにはさみ、RBS装置に入れる。  
RBSで各サンプルのデータをとる。下写真、RBS装置



シミュレーション RBSで測定したデータを元に、シミュレーションを行う

### 3 . RBS 理論

シミュレーションを行なう前に、RBSがどのようにして試料の測定をしているか、もう少し詳しく知っておく必要があるので以下に記す。

入射されるイオンは高速イオンであるため、弾性散乱はほとんどなく、非弾性散乱（電子励起）が起こる。このほとんどおこらない弾性散乱が、入射したイオンと試料の原子核との正面衝突に近い散乱なのである。この弾性散乱によって飛ばされたイオンのエネルギーを測定することで試料の組成分布などがわかるのである。今、入射エネルギー  $E_0$  で入射した高速イオンが物質中で後方散乱を受け、 $E$  というエネルギーで検出器に飛び込んでくる過程を考えると、イオンが失ったエネルギーは次の各エネルギーの和である。

- 1 . 表面からある深さ  $x$  の原子核まで直進する間に失ったエネルギー
- 2 .  $x$  において標的の原子核に与えたエネルギー
- 3 . 後方散乱されて  $x$  から物質中を逆戻りして物質外に出るまでに失ったエネルギー

このうち、2のエネルギーは原子核の質量によってきまるため、これから原子の種類を知ることができる。1と3のエネルギーからはその原子のある深さ  $x$  をしることができる。ただし、1と3については、エネルギーを求める計算の時に電子阻止能を考慮しなければならない。この電子阻止能とは、試料中に入った入射イオンが電子が集まって働くブレーキ作用によってエネルギーを失うことを表すものである。入射イオンが物質中を  $dx$  進むとき、 $dE$  のエネルギーをエネルギーを失うとして、 $(dE/dx)_e$  で表される。

では、入射イオンを試料の原子核に打ち込んだとき、どのようにして試料の原子の質量を知るのか、試料表面に原子がある場合を下に記す。

試料表面に質量  $M_2$  の原子が存在しているとき、これにより  $\theta$  の方向に散乱された入射したイオン（質量  $M_1$ ）のエネルギー（ $E$ ）と入射エネルギー（ $E_0$ ）の間には次の関係がある。

$$E = K \cdot E_0$$

$K$  は散乱定数で、エネルギーと運動量の保存則から次式で与えられる。

$$K = \left\{ \left( \frac{M_1 \cos \theta}{M_1 + M_2} \right) + \left[ \left( \frac{M_1 \cos \theta}{M_1 + M_2} \right)^2 + \left( \frac{M_2 - M_1}{M_1 + M_2} \right)^2 \right]^{1/2} \right\}^2$$

この  $K$  は、後方散乱（ $\theta = 180^\circ$ ）のとき、 $\sin^2 \theta = 0$  の近似から次のよ

うな式になる。

$$K = 1 - 2(1 - \cos \theta) M_1 M_2 / (M_1 + M_2)^2$$

いま、試料表面に質量の異なる2種類の原子、SiとAuがあるとする。Siによって散乱されたイオンのエネルギーを $E_{Si}$ 、Auによって散乱されたイオンのエネルギーを $E_{Au}$ として、この2つのエネルギーの差( $E$ )によって2つの元素を判別することができる。

$$\begin{aligned} E &= E_{Au} - E_{Si} \\ &= 2 E_0 M_1 (1 - \cos \theta) \left\{ \frac{M_{Si}}{(M_1 + M_{Si})^2} - \frac{M_{Au}}{(M_1 + M_{Au})^2} \right\} \end{aligned}$$

となるが、 $M_1$ は $H^+$ や $He^+$ の質量で $M_{Au}$ や $M_{Si}$ に比べると随分小さいので、 $E$ は次のようになる。

$$E = 2 E_0 M_1 (1 - \cos \theta) \cdot M / M_{Au} M_{Si}$$

ただし、 $M = M_{Au} - M_{Si}$  (なお、 $M_{Au} > M_{Si}$ )  
この $E$ が大きいほど、質量を判別できる。

そのためには、入射エネルギーを大きくする、入射イオンの質量が大きい程良い、できるだけ $\theta = 180^\circ$ に近づける 後方散乱のほうがよいという結論がでてくる。しかし、入射エネルギーを大きくしすぎると核反応を誘起する。入射イオンの質量が大きい重イオンだと試料に与えるダメージが大きくなり、かつ、SSDと呼ばれる半導体検出器での分解能が悪くなる。等ということもあって、1~3 MeVのHeイオンが主として用いられる。

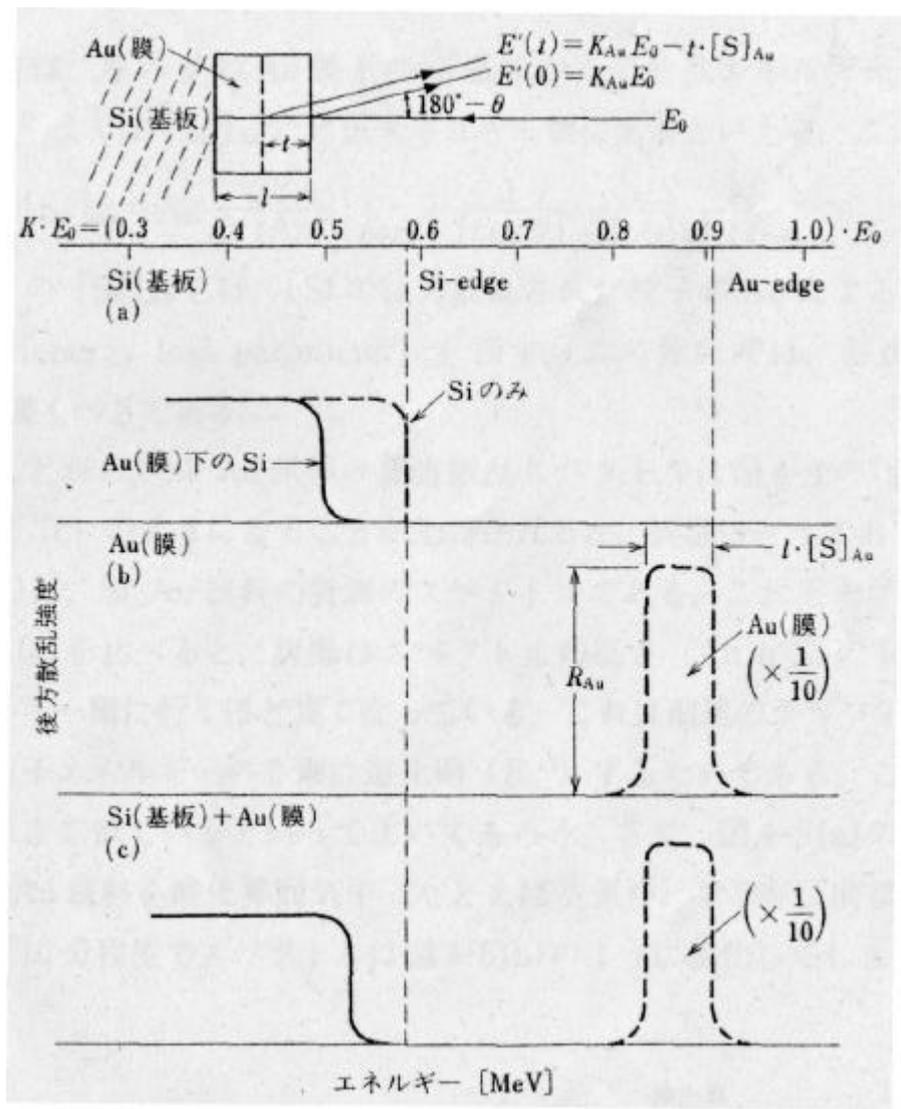


図1 Si基板 + Au薄膜試料のスペクトル

今、Si基板の表面にAuを蒸着して厚さdのAu膜をつけたとする。

(図1参照)

上で説明した試料中の原子の調べる方法は標的原子が試料表面にある場合である。では、表面でなく中の方の原子、つまり、深さ方向について調べる場合はどうなるだろうか。

深さ方向の情報を得るためには、入射イオンが表面から標的原子に達するまでの過程と弾性散乱後に表面を飛び出すまでの過程、この両方におけるイオンのエネルギー損失を考慮する必要がある。

入射エネルギー  $E_0$  で打ち出された  $He^+$  粒子のうち、試料表面のAu原子によって  $180^\circ$  に散乱された粒子は検出器中に

$$E = K_{Au} E_0$$

のエネルギーで飛び込んでくる。

一方、表面より  $t$  ( $t < d$ ) にある  $Au$  原子によって散乱されてから検出器に飛び込む粒子のエネルギーは次のようになる。

$$E = K_{Au} E_0 - t \cdot [S]_{Au}$$

$[S]_{Au}$  は  $Au$  による「後方散乱エネルギー損失係数」又は、「 $[S]$  因子」と呼ばれるものである。この  $[S]_{Au}$  は試料表面から内側の  $Au$  原子に到達する過程と  $Au$  原子に散乱されてから試料外に出るまでの過程で失われたエネルギーを表わすためのものであり、 $Au$  膜の電子阻止能 ( $dE/dx(Au)$ ) を用いる事で次式で与えられる。

$$[S]_{Au} = K_{Au} \cdot \{dE/dx(Au)\}$$

$$+ \{1/|\cos\theta|\} \cdot \{dE/dx(Au)\}$$

式の第1項は往路での、第2項は復路での入射イオンのエネルギー損失に対応している。したがって、深さ  $d$  に存在する  $Au$  原子から散乱される粒子は、 $K_{Au} E_0$  より  $E = d \cdot [S]_{Au}$  だけ低いエネルギーになるので、 $Au$  膜全体からの後方散乱粒子のエネルギースペクトルは図1 (b) のようになる。

次に、スペクトルの高さ ( $Y_{Au}$ ) を示す後方散乱強度 ( $RBS$  yield) について説明する。これは、次の式で与えられる。

$$Y_{Au} = K N_{Au} \sigma_{Au} / [S]_{Au}$$

$K$  を実験条件で決まる定数とし、 $N_{Au}$  は原子濃度であり、 $\sigma_{Au}$  はラザフォード散乱断面積で ( $Z_{Au}/E$ )<sup>2</sup> に比例している。この式より、深さ  $x$  において散乱された入射イオンのスペクトル強度はその場所における原子の個数に比例している事がわかる。

また、図1 (a) を見ると、 $Si$  基板によるエネルギースペクトルが  $Au$  膜がある場合とない場合とでは異なっている。これは、 $Au$  膜がある場合の  $Si$  では、入射イオンが  $Au$  を通って  $Si$  に達するまでとそこから  $Au$  を通って検出器に飛び込む間にエネルギー損失があるためである。

さて、ここで  $RBS$  を使う上で重要な言葉の一つ、エッジ (edge) について述べておく。エッジとは、試料表面に存在するとしたときの原子によって散乱されるときエネルギーを指す。散乱定数  $K_A$  を持つ  $A$  原子によって散乱されるエネルギー  $E_A = K_A E_0$  を「 $A$  原子 - エッジ」と呼ぶ。これを使う事で、厚さ  $d$  の  $Au$  膜下の  $Si$  基板の散乱エネ

ルギーの最高値を求められる。

$$[S_{Si}]_{Au} = K_{Si} \cdot \{dE/dx(Au)\} \\ + \{1/|\cos\theta|\} \cdot \{dE/dx(Au)\}$$

この式の $[S_{Si}]_{Au}$ とは、「 $S_i$ で後方散乱された粒子の $Au$ によるエネルギー損失係数を指す。

このようなRBSの理論に基づいてシミュレーションプログラムは作られていて、手作業では追いつかないような計算を瞬時に行ってくれるのである。

#### 4. シミュレーションについて

まず、知りたいのはどのぐらいの深さにどの程度の割合で $Au$ 、 $Cu$ が存在しているかである。シミュレーションでは、RBSで測定したスペクトルにシミュレーションのスペクトルを重ね、その時に描いたシミ

シミュレーションスペクトルのパラメータを読むことで、組成分布を知ることができるのである。つまり、シミュレーションとは元データから情報を得るためのフィッティング作業といえる。

#### ・シミュレーション方法

シミュレーションソフト「Ernie」の後方散乱スペクトル解析プログラムを用いる。

ランダム・スペクトルで多層構造、不純物分布の解析を行うために、RBSでサンプルを測定したときのデータを入れる。

このとき入力したシミュレーションのパラメータは以下のとおりである。なお、Cuは自然界に質量に差のある同位体が存在するため、それぞれ別の元素として入力してある。

#### ランダムプログラムの適用範囲

元素数	最大 10 元素
表面の層の分割	最大 9 層
データのチャンネル数	10 ~ 1023 チャンネル

#### ランダムデータの設定

入射エネルギー 2000 keV

入射粒子原子番号 2 (He)

入射粒子質量数 4.003 amu

構成元素の原子番号	試料 No. 1	29 (Cu)
	試料 No. 2	29 (Cu)
	試料 No. 3	79 (Au)

構成元素の質量	試料 No. 1	63 amu
	試料 No. 2	65 amu
	試料 No. 3	197 amu

上記数値入力後、9つの層に分けたAuとCuのターゲット各層における存在比と各層ごとの層の厚み[ $10^{15}$  個/cm<sup>2</sup>]に数値を入力して、シミュレーションスペクトルを表示する。このターゲット各層における存在比と各層の厚みにどのような数値を入れたかで、シミュレーションスペクトルの表示が変わる。つまり、このシミュレーションスペクトルをRBSで測定したスペクトルに近づけることで、測定したスペクトル

の各層における存在比と各層ごとの層の厚みの大まかな値がわかるのである。

下の図は、どのようにして、シミュレーションスペクトルを合わせるかの図である。試料の最表面を第1層として考えており、中に入っていく毎に2層、3層とわけていく。それぞれの層にどの元素がどれぐらいの割合で入っているかを考えて、そこに数値を入力しプログラムによってスペクトルを表示させる。この時入力する値のうち、層の厚みはエネルギーの方に強く依存し、また、元素の存在比は後方散乱強度の方に強く依存する。これは、RBS理論のところでも述べたエネルギーや後方散乱強度の定義から言えることである。このことから、層の厚みの方で横軸方向の、元素の存在比の方で縦軸方向の調整を行えるということがわかる。

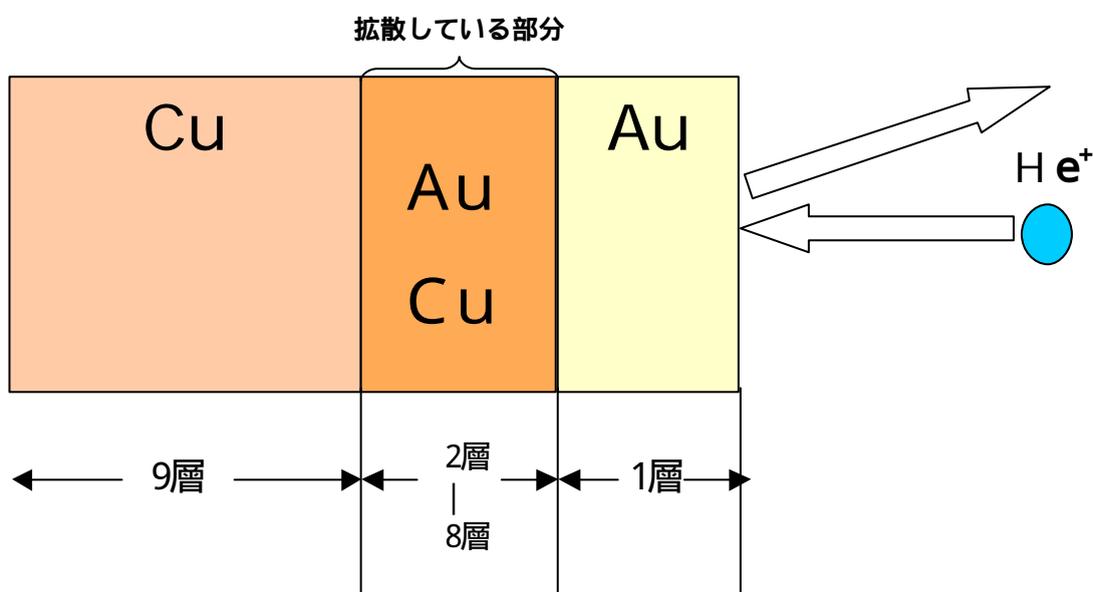


図2 シミュレーションの層の説明の図

## 5. 結果

A ~ Gのサンプルのうち、A、D、Gの3つのサンプルについてシミュレーションを行った。各サンプルの測定スペクトルとそのシミュレーションスペクトルを下にグラフ表記する。縦軸は後方散乱強度で、その場所における原子の個数に比例している。横軸は検出器に飛び込んだ入射イオンのエネルギーである。多数の黒い点によって表示されたスペクトルが測定されたスペクトルで、色付きで表示されているスペクトルがシミュレーションスペクトルである。

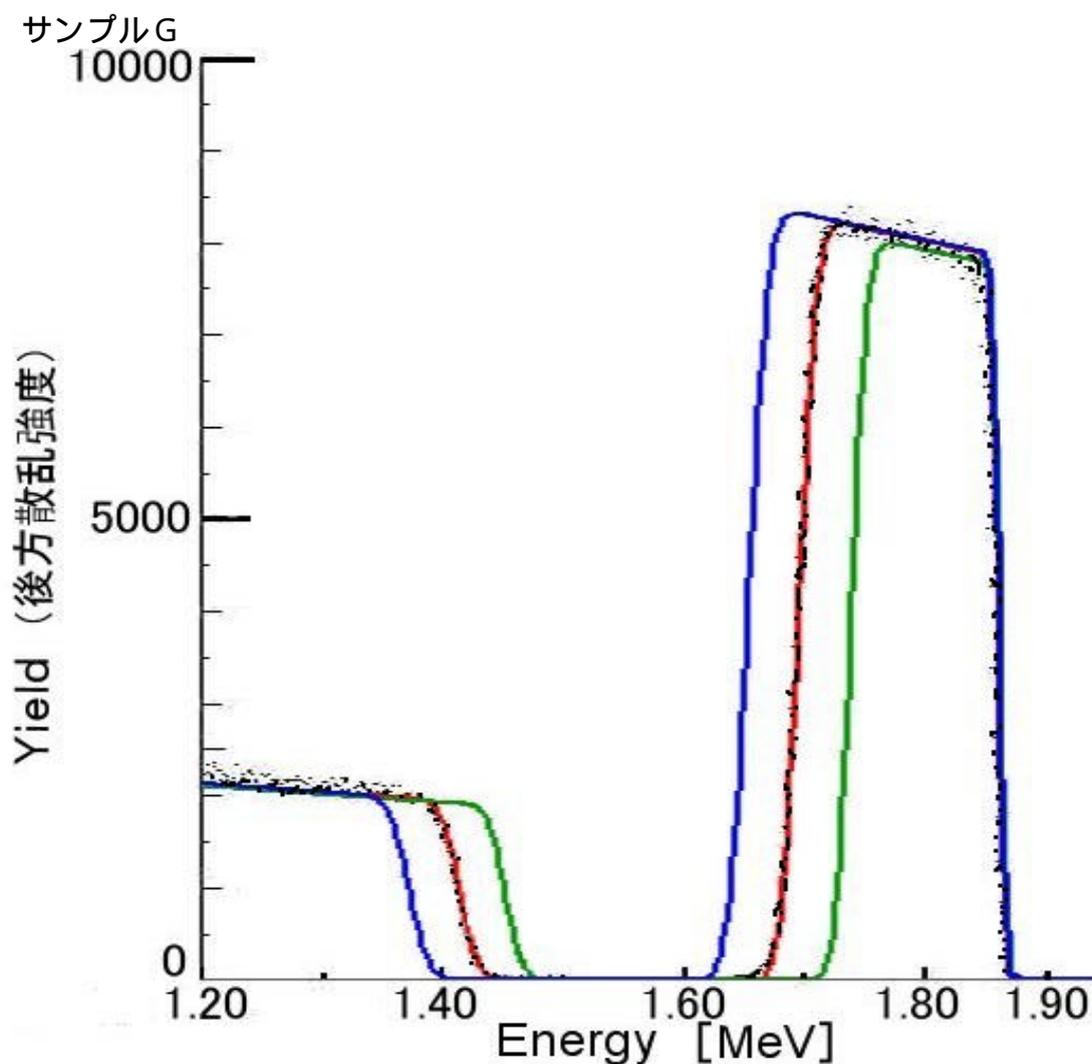


図3 サンプルG (300 K) のシミュレーショングラフ

図3は、サンプルG (300 K) の測定スペクトルとシミュレーションスペクトルをのせたグラフである。測定データのスペクトル右側を見ると、1.85 MeVの辺りから1.65 MeVの辺りにかけて山のようなスペクトルがある。これがAuを示すスペクトルである。そして、グラフ左側、1.45 MeV辺りから低エネルギー側へ伸びるスペクトル、これがCuを示すスペクトルである。

ここで、Auのスペクトルが図1(c)と違い、実際はスペクトルの高さが低エネルギー側に行くほど高くなっている。これは、理論のところでも述べた、ラザフォード散乱の断面積が粒子エネルギーの2乗に逆比例( $E^{-2}$ )するためである。

また、グラフ右側の1.8 MeVから1.9 MeVの間にある青い線は、わかりにくいですが青と赤と緑のシミュレーションスペクトルが重なったものである。このグラフを見て、青、赤、緑の3つのシミュレーションスペクトルのうち、黒い点の集まりで表示された測定データのスペクトルに一番近

いものは、赤のスペクトルである。この赤のスペクトルに入力したパラメータからこの測定データについての情報を得る事ができる。なお、サンプルG (300 K) については、熱処理を行っていない試料なので拡散が行われていないと考え、パラメータは1層目にAuの層の厚みを、2層目にCuの層の厚みを入力しただけの構成になっている。つまり、Auの膜厚の調整のみによってスペクトルを合わせている。スペクトルを合わせる時のAuの膜厚は、蒸着時についたと思われるAuの量を考慮して入力する。さて、測定データに一番近いと思われる赤のスペクトルのAuの膜厚であるが、入力する値では750 [atoms/cm<sup>2</sup>]となっている。これをm単位に直すには次の関係式が必要になる。

$$\left\{ \text{アボガドロ定数 (atoms)} \cdot \text{密度 (g / cm}^3\text{)} \cdot \text{膜厚 (cm)} \right\} / \text{原子量 (g)} = \text{層の厚み (atoms / cm}^2\text{)}$$

この関係式を用いて得られたAuの膜厚は39 nmである。

サンプルA

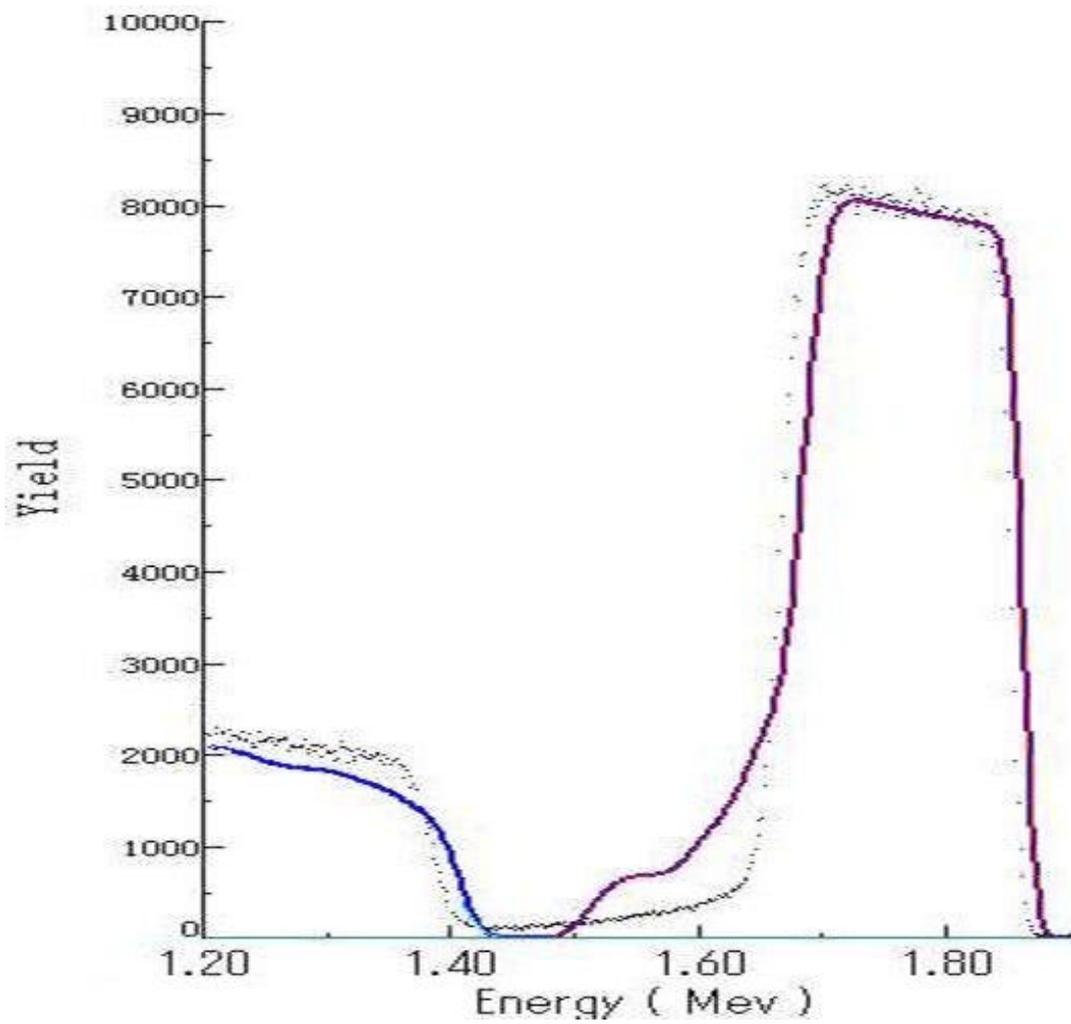


図4 サンプルA ( 400 K ) のシミュレーショングラフ

	1層	2層	3層	4層	5層
層の厚み[ $10^{15}$ atoms/cm <sup>2</sup> ]	800	300	300	600	99999
Auの存在比	0.95	0.2	0.1	0.05	0
Cuの存在比 (63 amu)	0.035	0.56	0.63	0.665	0.7
Cuの存在比 (65 amu)	0.015	0.24	0.27	0.285	0.3

表1 図4シミュレーションスペクトルのパラメータ

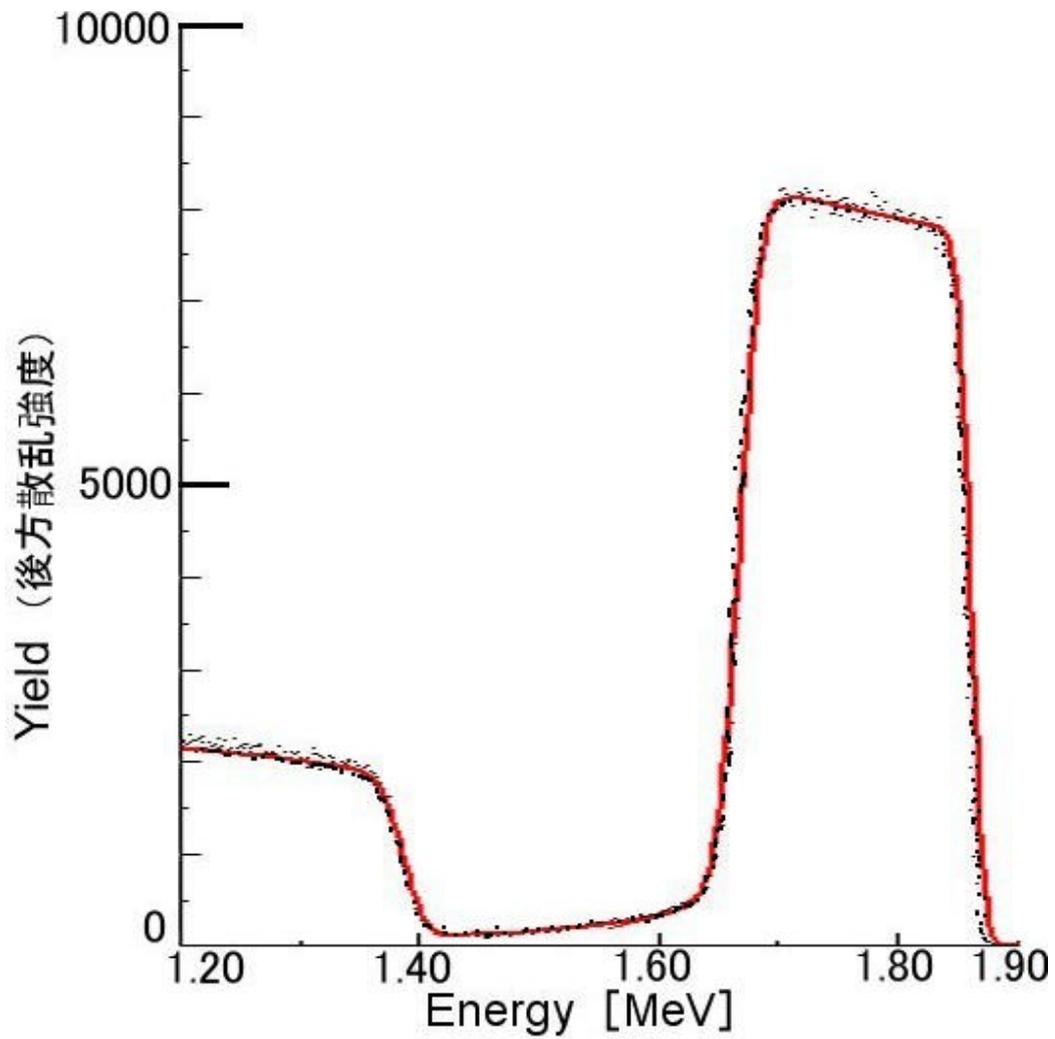


図5 サンプルA (400 K) のシミュレーショングラフ

	1層	2層	3層	4層	5層	6層	7層	8層
層の厚み [ $10^{15}$ atoms/ cm <sup>2</sup> ]	900	100	150	200	300	450	600	99999
A u の存在比	0.95	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.005	0
C u の存在比 (63 amu)	0.035	0.665	0.672	0.679	0.686	0.693	0.6965	0.7
C u の存在比 (65 amu)	0.015	0.285	0.288	0.291	0.294	0.297	0.2985	0.3

表2 図5のシミュレーションスペクトルのパラメータ  
図4、5は400 Kで100秒間熱処理をおこなった試料のシミュレーション

ングラフである。また、表 1 , 2 は図 4 , 5 のシミュレーションスペクトルに入力したそれぞれのパラメータの値である。このグラフの測定データのスペクトルを見ると、サンプル G のグラフと比べて Au と Cu の間のスペクトルが少し持ちあがったような形になっている。ここで拡散が起きているものと予想し、まず、表 1 のように試料を幾つかの層に仮定して分割し、それぞれの層に元素の割合を入力する。このとき、Cu が 2 つあるのはシミュレーション方法のところで述べた同位体を考慮しているためである。また、2 つの同位体の自然界における存在比の比率は 7 : 3 で、63amu の方が多く存在している。それと、表の最後の層 ( Cu のみの層 ) がとても大きな厚みになっているのは、Au の厚さが薄膜で 39 nm と小さいのに対し、Cu の厚さが 2 mm とはるかに大きいためである。

シミュレーションを行う際、まず、表 1 のように測定データを見て試料内がどのような元素分布になっているか予測して数値を入力する。これによって、スペクトルの形をつかみ、そこから各層の微妙な調整をしてスペクトルを合わせていく。そうして、スペクトルを合わせたものが図 5 である。表 2 を見てもわかるように、シミュレーションでは実に細かい数値の調整が必要になる。そのため、一つの測定データに対し何百ものシミュレーションが必要になる場合もある。

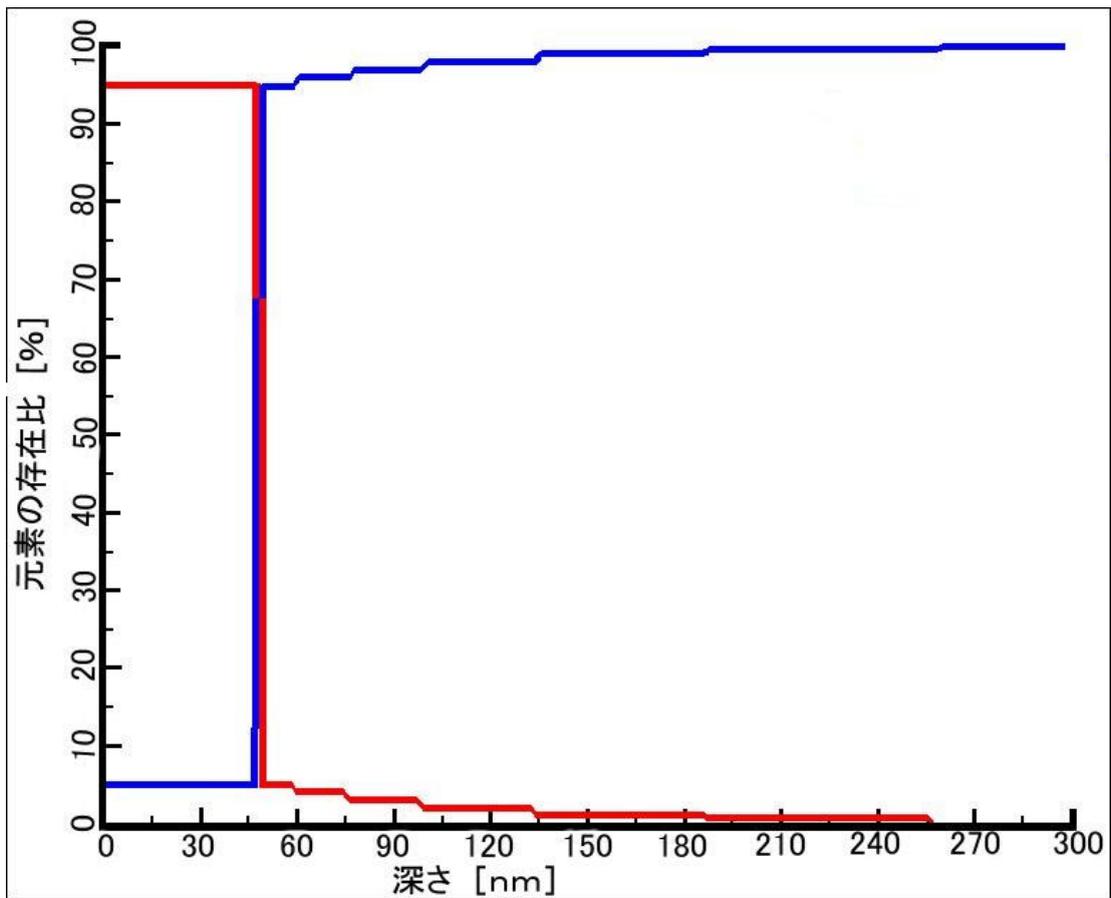


図6 サンプルA ( 400 K ) の元素分布図

図6は、表2のパラメータをグラフ化したサンプルAの元素分布図である。縦軸は各元素の存在比を%で表し、横軸は試料表面からの深さをnmで表している。また、赤い線がAuを示し、青い線がCuを示している。この図を見ると、Auが試料内側に向けて微量だが入っていることがわかる。

サンプルD

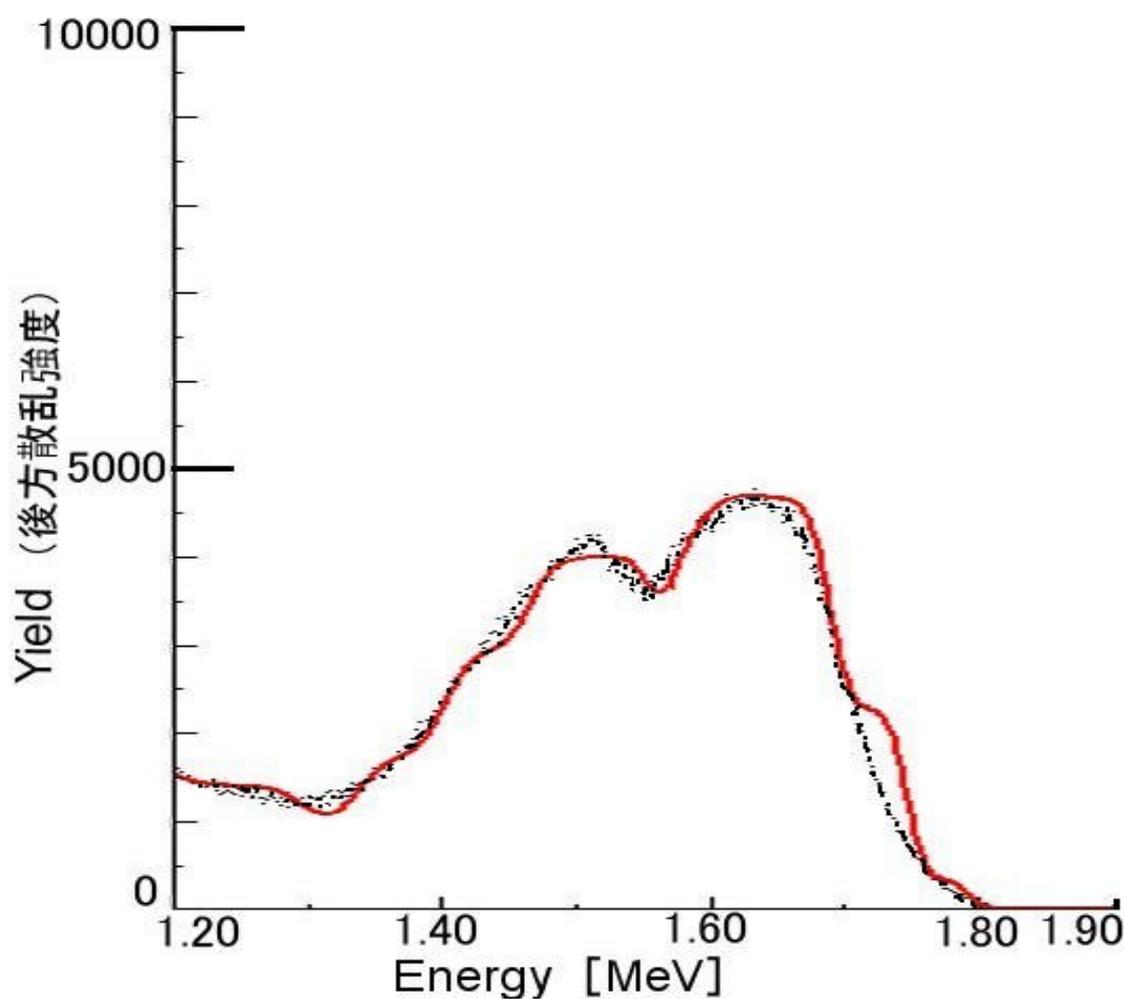


図7 サンプルD (550 K) のシミュレーショングラフ

	1層	2層	3層	4層	5層	6層	7層	8層	9層
層の厚み [ $10^{15}$ atoms/ cm <sup>2</sup> ]	500	450	500	520	180	650	420	450	99999
Auの存在比	0	0.02	0.15	0.435	0.38	0.22	0.15	0.06	0
Cuの存在比 (63 amu)	0.35	0.343	0.2975	0.3955	0.434	0.546	0.595	0.658	0.7
Cuの存在比 (65 amu)	0.15	0.147	0.1275	0.1695	0.186	0.234	0.255	0.282	0.3
Oの存在比	0.5	0.49	0.425	0	0	0	0	0	0

表3 図7のシミュレーションスペクトルのパラメータ

図7は550 Kで100秒間熱処理を行った試料のシミュレーショングラフ

である．図に示される赤のシミュレーションスペクトルが測定データのスペクトルに最も近いと思われるものである．表3は、図7上のシミュレーションスペクトルに入力した値である．なお、これには0(酸素)が新たに入力値として加わっている．この0の元素番号は8、質量は16 amu である．このサンプルDについては、測定データのスペクトルを見てわかるように他の2つのサンプルと比べて随分と変化が起きている．表3を見てもわかるように複雑な元素分布になっているのである．これをグラフとしたものを下に記す．

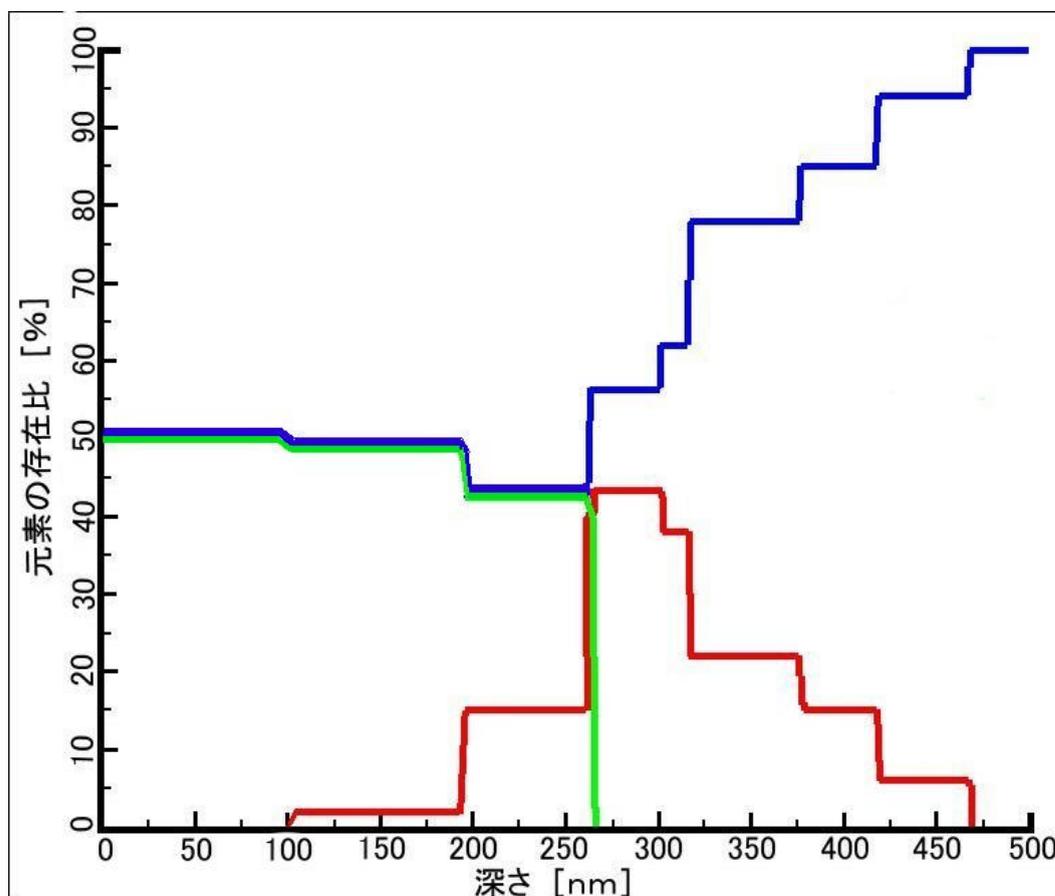


図8 サンプルD ( 550 K ) の元素分布図

上の図8の縦軸と横軸は図6と同じである．ただし、赤のAuを示す線と青のCuを示す線に加えて、緑のOの線が加わっている．

## 6 . 考察

サンプルAは、400 Kで100秒間熱処理をおこなったものである．これ

についてシミュレーションをおこなった結果得られた図6の元素分布図を見ると、Au Cuの相互拡散が微量ながら起きているように見られる。だが、拡散が起きていなくても表面付近でAuとCuが混ざることがある。今回の実験ではCu基板にAu薄膜を蒸着する際に、Auを高温で溶かして飛ばCuに堆積させるという方法をおこなっている。このように、蒸着をおこなった場合、Auがあまりにも高温であるためにCuの中に入り込む可能性があるわけである。しかし、このサンプルAについて言えば、図6を見るとわかるように約250 nmの辺りまでAuが奥に入っている為、熱処理によってAuとCuが相互拡散を起こしたものであると思われる。

サンプルDは、550 Kで100秒間熱処理をおこなったものである。この試料では、測定データを見てもわかるように幾つも考えさせられる点がある。そのうちの一つについて、まず考察する。

図7を見ると、スペクトルが山が2つ重なったような形になっている。なぜ、このような形のスペクトルになっているのか。これは、AuのスペクトルとCuのスペクトルとが重なった合成スペクトルであるからである。拡散が起こった場合、Auのスペクトルは図3に示されているような山の形から崩れて、グラフ左の低エネルギー側に広がる。逆に、Cuのスペクトルはグラフ右側の高エネルギー側に広がっていくはずである。なぜなら、相互拡散の場合、Auが試料中に入っていくのに対し、Cuは試料表面に向かうように混ざった形になるからである。RBSでは、試料表面ほど高エネルギー側、試料内側ほど低エネルギー側にスペクトルが表示される。つまり、相互拡散が起きることによって、Auのスペクトルは低エネルギー側に広がり、Cuのスペクトルは高エネルギー側に広がって2つのスペクトルが重なってしまうのである。そのため、図7のスペクトルは山が2つ重なったような形になって描かれているのである。

また、この試料のように550 Kという高温で熱処理をおこなうと、試料内での原子の動きがかなり大きく急激な拡散が起きたと考えられるため、それによってこのような形になったとも思える。

サンプルDの測定データについて、もう一つ気になる点としてスペクトル右側の場所である。(図7)拡散がおこなわれたと思われるサンプルA、拡散が行われていないと思われるサンプルG、どちらも1.8 MeV ~ 1.9 MeVの間にスペクトルの右端があるのに対し、(図3, 5)サンプルDでは、スペクトルの右端は1.8 MeVのところにある。(図

7) 先の2つについてのみ考えてみると、拡散がおこなわれていても、そうでなくても試料表面にはAuがあるはずである。しかし、図7を見るとAuのスペクトルが明らかにずれている。シミュレーションをおこなう時にデータ入力ミスが起きていないことを確かめた上で考慮した結果、試料表面にAu以外の何かがあるという結論になった。

では、試料表面にあるものは何か。はじめに考えたのが、RBSで試料を測定する際にゴミがついたのではないかとということであった。しかし、実験をおこなう際は、それなりの注意を払って測定している。測定時に試料表面に何かがついたという可能性は無いとはいいきれないが少ないと思える。

それでは何が試料表面にあるのか。先ほど、考察で急激な拡散が起きたと述べたが、そこに答えがある。高い熱エネルギーを与えられて活性化した原子は、その移動範囲が広がる。つまり、このサンプルDでは、Auの厚さが39 nmと薄い薄膜であったために、その中を通してCu原子が試料表面まで出てきたのである。この試料表面に出てきたCu原子に対し、空気中の酸素が反応しCuとOの化学反応が起きる。このように、試料表面にはCuO(酸化銅)が出来ていたのである。そのため、表3では、Oの存在比が加えられているのである。

また、このCuOの生成によって、図8のようにAuは試料内の表面側と内側にわたって拡散している。このことから、サンプルA, G(図3, 5)ではほぼ直角になっているスペクトル右端が、サンプルD(図7)では山のような形になっていることがわかる。

。

## 7. まとめ

この研究では、Au-Cu相互拡散について調べるために、試料の作成からシミュレーション作業までを1つの実験としておこなった。まず、適度な大きさとなるCu基板を7つ用意し、それらにAu薄膜を蒸着させる。次に、Au-Cu基板7つに対して、それぞれ 400 Kで100秒間熱処理したもの 400 Kで1000秒間熱処理したもの 400 Kで10000秒間

熱処理したもの 550 Kで 100 秒間熱処理したもの 550 Kで 1000 秒間熱処理したもの 550 Kで 10000 秒間熱処理したもの 熱処理をおこなわないもの(300 K) と条件を与える。これら 7つの試料について調べるためにRBSで測定。得られたデータのうち、3つのデータについてシミュレーションをおこなった。

3つのデータとは、熱処理をおこなっていないものと、400 Kで 100 秒間熱処理したものと、550 Kで 100 秒間熱処理したものである。これらについてシミュレーションをおこなうことで、その試料内の元素分布、深さ方向の情報を知ることができる。この3つの得られたシミュレーション結果を比較することで、与えられた条件によって試料がどう異なっているかがわかるのである。このようにして、サンプルA、D、Gを比較してみてもわかったことを以下に述べる。

サンプルAでは、サンプルGと測定データを比較してもわかるように、スペクトルの変化が少ない。このことを考慮してシミュレーションをおこなった結果、図6のように微量にAuが試料中に入っていることがわかった。

サンプルDは、サンプルA、Gと比べて随分とスペクトルの形が変わっている。このことから、あらゆる条件を考慮してシミュレーションをおこなった結果、図8のような深さ方向の情報をえることができた。この図8を見てもわかるように、試料表面には酸化銅ができたものと思われる。また、図6のようにサンプルAではAuが試料中 250 nmほどまで微量に広がっているのに対し、図8のようにサンプルDではAuが 100 nmから 470 nm辺りとかかなり広く分布していることがわかる。

今回の研究では、上記のように温度条件の違いによって、その試料中の元素分布が大きく変わることを、つまり、拡散の度合いが違ってくるということがわかった。また、特に興味深かったのが、大気中における高温熱処理では相互拡散だけでなく、酸化の効果もあるということである。

## 8. 参考文献

成沢 忠、平木 昭夫 著「表面・界面の分析と評価」 オーム社  
(1994)

山科 俊郎、福田 伸 著「表面分析の基礎と応用」東京大学出版会  
(1991)

## 9 . 謝辞

最後に、この研究を行うにあたり御教授頂いた、成沢 忠 教授、院生の長木 正錦さん、また、共に研究を行い協力していただいた横江 真さん、勝俣 貞幸さんに対し、深く御礼申し上げます。