

角度分解軟 X 線光電子分光法とサイトスペシフィック発光分光法を併用した、SiO₂/Si 界面近傍の遷移層の原子配置と電子状態の相関に関する研究

Study on correlation between atomic coordination and electronic structure of transition layers at SiO₂/Si interface by using angle-resolved soft x-ray photoelectron spectroscopy and site-specific emission spectroscopy

¹廣瀬和之、²野平博司、³木下豊彦、³室隆桂之、⁴原田慈久、²鈴木治彦、²竹永祥則、
²古川亮介、²北村幸司、⁵服部健雄

¹Kazuyuki Hirose, ²Hiroshi Nohira, ²Toyohiko Kinoshita, ²Takayuki Muro,
³Toshihisa Harada, ²Haruhiko Suzuki, ²Yoshinori Takenaga, ²Ryousuke Furukawa,
²Kouji Kitamura, and ⁵Takeo Hattori

¹宇宙航空研究開発機構、²武蔵工業大学、³高輝度光科学研究センター、⁴理研、
⁵東北大学

¹ISAS/ JAXA, ²Musashi Institute of Technology, ³JASRI, ⁴Riken, ⁵Tohoku University

角度分解光電子分光測定で SiO₂/Si (100) 界面近傍に局在する組成遷移層の原子配置が酸化の進行に伴いどのように変化するかを明らかにすると同時に、サイトスペシフィック発光分光測定で、原子配置との相関のもとに局所的な電子状態を明らかにする。そして、Si (111) 表面の理想的な酸化過程とは対照的にいまだ明らかにされていない、Si (100) 表面の酸化過程のナノスケールの描像を考察する。

Angle-resolved x-ray photoelectron spectroscopy study and site-specific x-ray emission study are performed on ~1nm-SiO₂/Si(100) interfaces to investigate compositional transition layers near the interfaces from standpoint of atomic and electronic structures.

キーワード X線光電子分光、発光分光、シリコン、シリコン酸化膜、界面

実験目的： SiO₂/Si 界面の原子構造あるいは酸化過程は、微細化がナノスケールにまで進んだ MOS トランジスタにおいてその説明が強く望まれている。本研究の目的は、SiO₂/Si 界面近傍の原子配置と電子状態の相関を明らかにするという新しい切り口で、この課題に取り組むことにある。

具体的には、角度分解光電子分光測定で SiO₂/Si (100) 界面近傍に局在する組成遷移層の原子配置が酸化の進行に伴いどのように変化するかを明らかにすると同時に、サイトスペシフィック発光分光測定で、原子配置との相関のもとに局所的な電子状態を明らかにする。そして、Si (111) 表面の理想

的な酸化過程とは対照的にいまだ明らかにされていない、Si(100)表面の酸化過程のナノスケールの描像を考察する。

実験方法： 武蔵工大において水素終端した超平坦 Si 基板を用いて熱酸化により酸化膜の厚さが 1 分子層あるいは 2 分子層の試料 { 0.87nm SiO₂/Si(100) 、 1.23nm SiO₂/Si(100) } を作製した。

これらの試料を窒素封入保管状態で SPring-8 に持ち込み、電子分光器と発光分光器を備えたビームライン (BL27SU) の真空チャンバー内にセットした。まず、電子分光器の分解能を 200meV (Si2p) に、発光分光器の分解能を 1120 (550eV) となるよう調整した。角度分解光電子分光測定は、SiO₂/Si(100) 試料から放出する Si2p と 01s 光電子を極角を変えて (8-80°) 測定した。光電子の脱出深さを揃えるために、Si2p スペクトル、01s スペクトルは、それぞれ入射光エネルギーを 1050eV、1481eV で測定した。

サイトスペシフィック発光分光測定は、SiO₂ 価電子帯中の 02p から 01s への遷移に伴う発光を分光した。まず、入射光エネルギーを 01s の励起に必要な 550-525eV (参考文献 1) に変えて、吸収スペクトル (基板電流) を測定した。次に、吸収スペクトルに現れた特徴的な構造を考慮して選択した入射光エネルギー (530.0eV, 530.7eV, 531.5eV, 534eV, 537eV) で、発光スペクトルを測定した。

実験結果： 測定された Si2p スペクトルを波形分離して、組成遷移層成分 (中間酸化状態) のピーク強度の角度依存性を求めた。図 1 に酸化膜厚 0.87nm の試料について 01s ピーク強度で規格化した結果を示す。中間酸化状態が Si¹⁺、Si²⁺、Si³⁺と異なると、角度依存性が異なることが分かった。これは、各中間酸化状態の存在する位置 (各中間酸化状態の界面からの距離) が明らかに異なることを示している。

各中間酸化状態の界面からの距離 (組成遷移層の原子配置) を特定するために、Si2p 、 01s 信号の強度比をマキマムエントロピー法で解析中である。

入射光エネルギーを、530.0eV, 530.7eV, 531.5eV, 534eV, 537eV と変えた時の、酸化膜厚 0.87nm の試料の発光スペクトルを図 2 に示す。入射光エネルギーに依存して、発光スペクトルの形状が著しく変化すること

が分かった。これは、局所的電子状態が、中間酸化状態の化学結合状態に応じて大きく変化していることを示している。

そこで、これらの局所的電子状態を有する界面構造を推定するために、界面構造をモデル化したクラスターに対する第一原理計算を実行しているところである。

検討予定： 酸化膜の厚さが 1 分子層、2 分子層と異なる SiO₂/Si(100) 試料についての解析から、組成遷移層の原子配置や電子状態が酸化の進行に伴いどのように変化するかを明らかにする。さらに、酸化過程のナノスケールの描像について考察する。

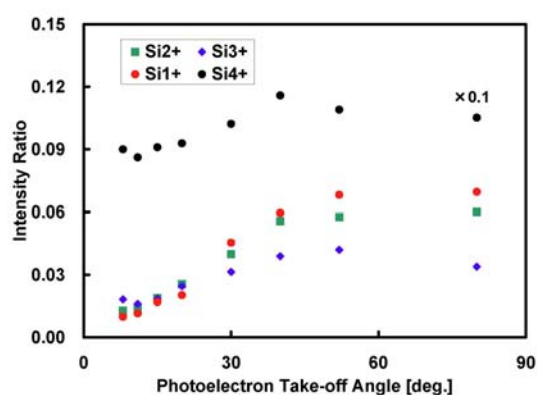


Fig. 1. XPS Si 2p peak intensity of each oxidation state as a function of take-off angle.

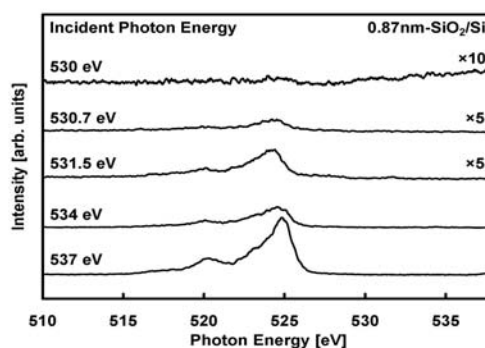


Fig. 2. O K-edge soft-x-ray emission spectra as a function of incident photon energy.

参考文献：

1) 山下良之、平成 18 年度第 2 回ナノテク総合支援プロジェクトワークショップ