

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 structure and electronic structure
of compositional transition layer at SiO₂/Si interface
by using angle-resolved soft x-ray photoelectron spectroscopy and
site-specific emission spectroscopy**

廣瀬和之^a, 野平博司^b, 寺本章伸^c, 諏訪智之^c, 服部健雄^c,

原田慈久^d, 室隆桂之^e, 木下豊彦^e

Kazuyuki Hirose^a, Hiroshi Nohira^b, Akinobu Teramoto^c, Tomoyuki Suwa^c, Takeo Hattori^c,
Yoshihisa Harada^d, Takayuki Muro^e, Toyohiko Kinoshita^e

^a宇宙研, ^b武蔵工業大学, ^c東北大学, ^d理研 SPring-8, ^e原研 SPring-8

^aInstitute of Space and Astronautical Science, ^bMusashi Institute of Technology, ^cTohoku University,

^dRIKEN/SPring-8, ^eJASRI/SPring-8

SiO₂/Si(100)とSiO₂/Si(111)の2種類の試料について、Si2p光電子スペクトルを角度測定することにより、組成遷移層の原子構造が基板面方位によりどのように異なるかを高精度に明らかにする。さらに、サイトスペシフィック発光分光測定で得られる局所的な電子状態を再現する界面構造モデルを第一原理計算により検討する。

We perform angle-resolved soft x-ray photoemission spectroscopy measurement of Si 2p spectrum for SiO₂/Si(100) and SiO₂/Si(111) to identify the location of each of the intermediate oxidation states. In addition, we perform site-specific emission spectroscopy measurement for the same samples to reveal partial density of states of the valence band. By combining the two kinds of measurements, we deduce the interface structure for these interfaces.

キーワード : SiO₂/Si、界面構造、角度分解測定、発光分光測定

実験目的 :

SiO₂/Si(100)とSiO₂/Si(111)の2種類の試料を作製して、角度分解 Si2p、01s 光電子スペクトルを測定することにより、組成遷移層の原子構造が基板面方位によりどのように異なるかを高精度に明らかにする。さらに、サイトスペシフィック発光分光測定で得られる局所的な電子状態を再現する界面構造モデルを第一原理計算により検討する。

実験方法 :

超平坦 Si(100)および Si(111)基板上にド

ライ熱酸化によって 1.1nm の膜厚 の酸化膜を形成した試料を武蔵工業大学で準備して乾燥窒素雰囲気中で SPring-8 に持ち込み、BL27SU の測定室で角度分解光電子分光測定と吸収・発光分光測定とを行い、両試料の界面構造と電子状態を比較した。

角度分解光電子分光測定では、1050 eV の入射光を用いて、脱出角度を 10、15、20、30、40、52、90 度と変えて Si2p を測定した。

一方、吸収・発光分光測定では、まず入射光エネルギーを 01s の励起に必要な 550-525eV (参照 : 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)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(530.7eV、531.5eV、534eV、537eV)で、発光スペクトルを測定した。

実験結果：

脱出角度を10、15、20、30、40、52、90度と変えて測定したSiO₂/Si(100)試料とSiO₂/Si(111)試料のSi2pスペクトルの角度分解測定の結果を、それぞれFig.1とFig.2に示す。組成遷移層成分(中間酸化状態)のピーク強度とその角度依存性が、基板の面方位に依存して大きくことなることがわかった。すなわち界面の中間酸化状態はSi(100)界面(Fig.1)とSi(111)界面(Fig.2)では顕著な違いがあることが明らかとなった。そこで、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、さらに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ナムエントロピー法で解析中である。

一方、吸収スペクトルならびに、励起光532.5、534.5、636.5、639 eVで測定した発光スペクトルにおいては、両者にほとんど違いがないことが明らかになった。すなわち02pが関与する価電子帯部分状態密度はほぼ同じであることが分かった。これまでにSi(111)に関する発光分光の結果が山下等によって報告されているが、今回の結果はそれとは一致せず、Si(111)界面においてSi-O-Siの結合角が180度であると主張された結論を支持しない結果となった。今後詳細な解析を行い、Si(100)とSi(111)界面構造を明らかにする予定である。

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。

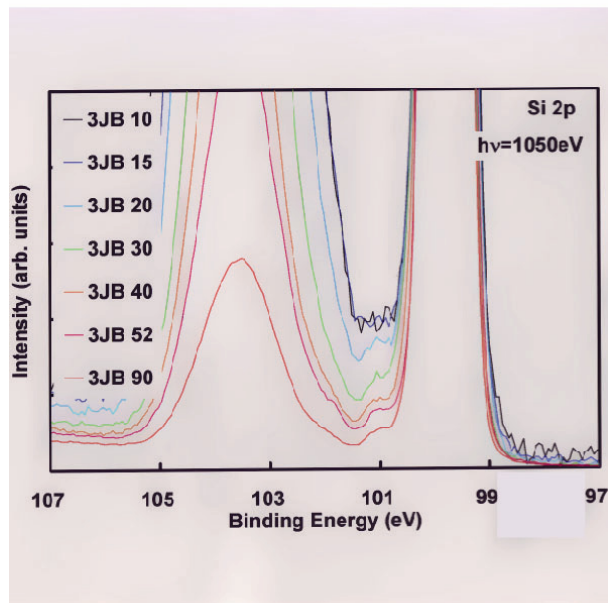


Fig.1 Angle-resolved XPS measurement on SiO₂/Si(100).

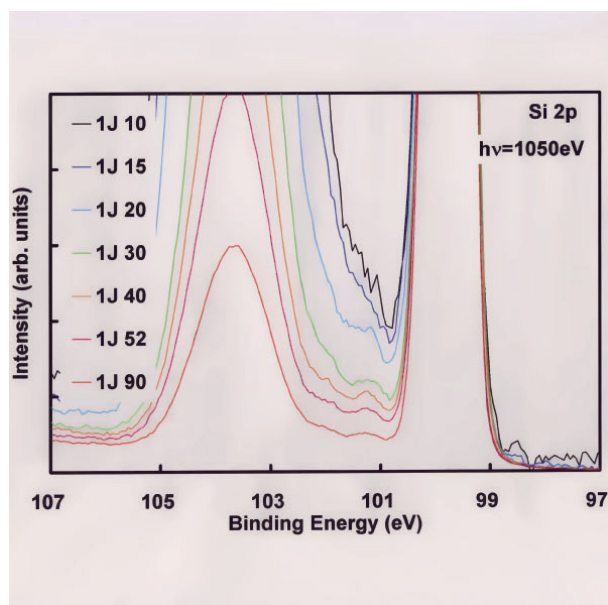


Fig.2 Angle-resolved XPS measurement on SiO₂/Si(111).