

# 光電子分光ホログラフィーによる As ドープ Si 中の ドーパント複数サイトの原子配列イメージング

## Individual Atomic Imaging of Multiple Dopant Sites in As-Doped Si Using Spectro-Photoelectron Holography

東工大<sup>1</sup>, 高輝度光科学研究センター<sup>2</sup>, 阪大<sup>3</sup>, 名工大<sup>4</sup>, 分子研<sup>5</sup>

○筒井 一生<sup>1</sup>, 松下 智裕<sup>2</sup>, 名取 鼓太郎<sup>1</sup>, 室 隆桂之<sup>2</sup>, 森川 良忠<sup>3</sup>, 星井 拓也<sup>1</sup>,  
角嶋 邦之<sup>1</sup>, 若林 整<sup>1</sup>, 林 好一<sup>4</sup>, 松井 文彦<sup>5</sup>, 木下 豊彦<sup>2</sup>

Tokyo Tech<sup>1</sup>, JASRI<sup>2</sup>, Osaka Univ.<sup>3</sup>, Nagoya Inst. Tech.<sup>4</sup>, Inst. Molecular Science<sup>5</sup>

○Kazuo Tsutsui<sup>1</sup>, Tomohiro Matsushita<sup>2</sup>, Kotaro Natori<sup>1</sup>, Takayuki Muro<sup>2</sup>, Yoshitada Morikawa<sup>3</sup>,  
Takuya Hoshii<sup>1</sup>, Kuniyuki Kakushima<sup>1</sup>, Hitoshi Wakabayashi<sup>1</sup>, Kouichi Hayashi<sup>4</sup>,  
Fumihiko Matsui<sup>5</sup>, and Toyohiko Kinoshita<sup>2</sup>

E-mail: ktsutsui@ep.titech.ac.jp

半導体への不純物ドーピングの技術的課題のひとつに、ドーパントの高濃度活性化がある。ドーパント原子が単独で結晶格子サイトを置換することで活性化するのにに対し、クラスター化などにより異なるサイト占有や原子配置をとると不活性化になると考えられている。従って、この課題の克服には、まずはその構造を把握することが重要である。しかし、結晶中に非周期的に存在するドーパント原子とその周囲の原子配列を 3 次元的に計測評価することはこれまでほとんど不可能であった。

本論文では、光電子ホログラフィー法[1]を用いて、Si 中にドーピングした As に対して、活性な As と二種類の異なる原子配列構造をとる不活性な As を識別しながらそれらの三次元原子配列構造を描出したことを報告している[2]。

光電子ホログラフィーは、結晶中の原子から放出される光電子が周囲の原子で散乱干渉する状況を表面からの放出の方位依存性として観測した光電子ホログラムを取得し、ここから計算により原子の実空間配置を原子配列像として再生する。また、検出する光電子のエネルギー分光で原子の化学結合状態を識別分離し、その成分ごとに原子配列構造を再生できる。

評価試料は、Si(100)ウエハに As イオン注入後、活性化アニールと表面からのエッチングで作製した。光電子ホログラフィーの測定実験は、SPRING-8 のビームライン BL25SU で実施した。

Fig.1 に得られた As 3d 内殻光電子スペクトルとピーク分離した 3 成分それぞれの光電子ホログラムを示す[1]。各ピークには BEH, BEM, BEL とラベルづけした。各ホログラムの比較から、BEH と BEM は構造に相違点はあるが、いずれも As 原子が Si の格子サイトを置換している特徴を共通に持っている。BEL は明瞭な

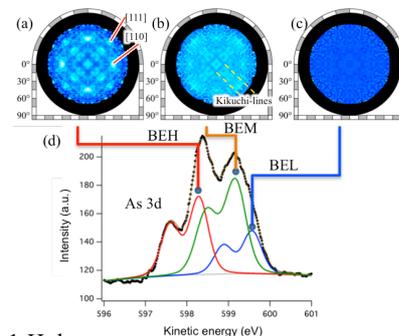


Fig. 1 Holograms generated from the spectra labeled (a) BEH, (b) BEM, and (c) BEL, and (d) As 3d photoelectron spectra with labels. [2]

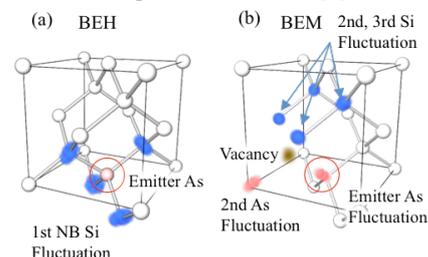


Fig. 2 Reconstructed structural images for (a) BEH and (b) BEM cases. [2]

構造が無く、As 原子の周りが非晶質状であることが示唆された。

BEH と BEM について、原子配列像の再生を行うと共に、第一原理計算による種々提案されている As クラスタ構造の化学シフトを計算して実験結果と比較、ホール効果測定によるキャリア濃度評価との比較等の手続により絞り込んだ原子配列構造を Fig. 2 に示す。BEH は、単独の As が格子置換して活性化している状態、一方 BEM は、 $As_nV(n=2\sim4)$  と呼ばれる空孔周りに  $n$  個の As が格子置換しているクラスタ構造をとり不活性化している状態と結論づけた。

謝辞：本研究は科研費新学術領域研究「3D 活性サイト化学」26105014 の助成で行われた。

[1] 大門寛, 応用物理, 85(1), 21, (2016).

[2] K. Tsutsui *et al.*, Nano Letters, 17, 7533 (2017).