

# 光電子ホログラフィーによる半導体中の不純物の 3D 原子イメージング

## 3D Atomic Imaging of Impurities Doped in Semiconductors

### Using 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>, 小川 達博<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>, Tatsuhiro Ogawa<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は、普遍的な重要技術といえる。その課題のひとつに、ドーパントの高濃度活性化がある。ドーパント原子は単独で特定の結晶格子サイトを置換することで電氣的に活性化するが、クラスター化などにより異なる原子配置をとると不活性になる。これを制御するには、その対象となる構造を原子レベルで三次元的に直接把握することが必要であるが、これは非常に難しいことであった。結晶中のドーパント原子の周辺構造の観察が難しいのは、それらが結晶内で非周期的に存在していることに一因がある。そのため、例えば X 線回折法は使えず、従来は、XAFS 法、イオン散乱法、TEM-STEM 法等が利用されてきた。しかし、これらの手法では三次元構造を直接把握するのは難しい。さらに、ドーパント原子の活性/不活性は直接識別できない。

これに対し、光電子ホログラフィー法[1]は、半導体中のドーパント原子をその電氣的活性と結びつけながら三次元原子配列構造を解析する手法として非常に有用といえる。ここでは、Si 中の As に対してこの観察評価を行った結果を報告する[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像として再生する。また、その光電子スペクトルのピーク分離によって、その成分ごとに原子配列構造を再生できる。

測定実験は、SPring-8 のビームライン BL25SU で実施した。Fig. 1 に As 3d 光電子スペクトルを示す。

BEH, BEM, BEL とラベル付けした 3 つのピークに分離し、それぞれの成分でホログラムを取得した。その結果、BEH と BEM

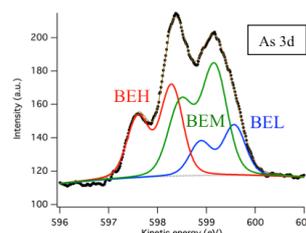


Fig. 1 Observed As 3d spectrum.

で明確なホログラムが得られ、BEL ではホログラムにパターンが得られず干渉が起きていない状況であった。BEM と BEL に対して、ホログラムから原子配列像を再生した結果を Fig. 2 (a)~(c)および(e)~(g)に示す。これにさらに、第一原理計算による化学シフトの計算結果との照合などの検討を加えた結果、最終的に Fig. 2 (d)および(h)に示す原子配列構造に結論づけた。BEH では単独の As が格子置換して活性化し、BEM では  $As_nV(n=2\sim4)$  と呼ばれる空孔周りに  $n$  個の As が集まるクラスターを形成し不活性化していることが示された。

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).

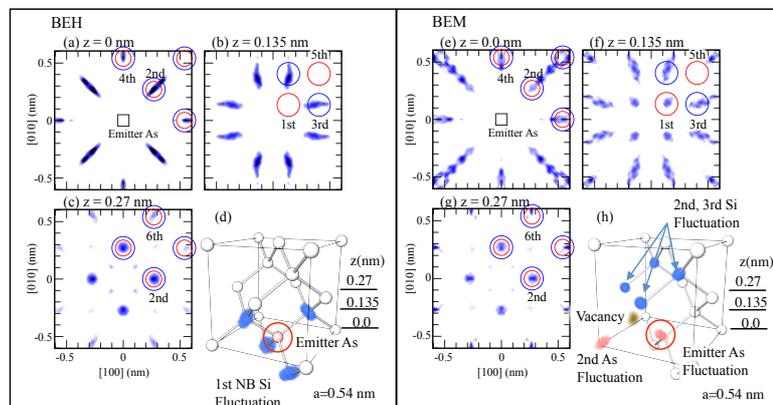


Fig. 1 Atomic images reconstructed from the hologram of each atomic site. The BEH cross sections are labeled as  $z =$  (a) 0, (b) 0.135 ( $= a/4$ ), and (c) 0.27 nm ( $= a/2$ ). Structural image is shown in (d). The BEM cross sections and structural image are shown in (e)–(h) in the same manner. Notable Si atoms and vacancies near to the “Emitter As” are blue and brown, respectively, and fluctuating atoms appear blurry. [2]