

温度可変放射光 X 線回折による熱酸化およびスパッタ SiO₂/Si 界面の熱特性評価 Evaluation of Thermal Properties for Thermal and Sputtered SiO₂/Si Interface by X-ray Diffraction with Temperature Dependence

○横川 凌^{1,2}、渡辺 剛³、廣沢 一郎^{4,2}、富田 基裕⁵、渡邊 孝信⁵、小椋 厚志^{1,2}
(1.明大理工、2.明大 MREL、3. JASRI、4. 九州シンクロトロン光研究センター、5. 早大理工)
○R. Yokogawa^{1,2}, T. Watanabe³, I. Hirose^{4,2}, M. Tomita⁵, T. Watanabe⁵, and A. Ogura^{1,2}
(1. Meiji Univ., 2. MREL, 3. JASRI, 4. SAGA-LS, 5. Waseda Univ.)

E-mail: r_yokogawa@meiji.ac.jp

【背景と目的】Siは電気伝導率を維持しつつ、微細化などの手段によって、熱伝導率の顕著な低下が可能なことから、熱電発電デバイスへの応用が期待されている。熱伝導率低下の要因として、SiO₂/Si界面に局在する無秩序な歪が大きく関与していることが分子動力学(MD: Molecular Dynamics)計算により示され[1]、SiO₂/Si界面に着目した歪量および熱特性評価は高効率熱電発電デバイス実現に重要である。しかし、SiO₂界面に着目した熱特性の実測は難しく未だ理論計算に留まっている。このような背景を鑑み、我々は放射光X線回折(XRD: X-ray Diffraction)で得られる表面・界面に敏感なCTR (Crystal Truncation Rod)散乱に着目した[2]。本研究ではCTR散乱強度分布から熱酸化(Si基板から直接成長)およびスパッタリング(Si基板に堆積)で作製された異なるSiO₂膜に対し、これらSiO₂/Si界面が温度変化によりどのような振舞いを示すのか温度可変放射光XRDを用いて比較検討を行った。

【実験】試料はSi基板にSiO₂膜を熱酸化(850 °C, 3 h)、およびマグネトロンスパッタリングにより2種類作製した(設定膜厚: 約25 nm)。SiO₂/Si界面近傍の結晶状態はUVラマン分光法により確認した(励起波長: 355 nm)。温度可変放射光XRDはSPring-8のBL19B2に設置された多軸回折装置によりエネルギー10 keVのX線を用いて実施した。00L方向に沿ったCTR散乱強度分布を測定し、室温および600 Kの2条件で行った。

【結果・考察】熱酸化 SiO₂/Si 試料の 004 回折近傍における CTR 散乱強度分布を Fig. 1 に示す(θ -2 θ scan)。Si の理想表面を仮定して計算を行った CTR 散乱強度分布と一致せず、SiO₂/Si 界面は熱酸化により形成された SiO₂ の影響で微小な歪が印加されていると考えられる[3]。600 K では CTR 散乱強度分布が室温と異なることから、SiO₂/Si 界面の歪状態および熱振動の振舞いが温度によって異なることが示唆される。

スパッタ SiO₂/Si 試料の 004 回折近傍における CTR 散乱強度分布を Fig. 2 に示す(θ -2 θ scan)。熱酸化 SiO₂/Si と同様に、Si の理想表面を仮定した散乱強度分布計算結果と一致せず、さらに Fig. 1 と比較したところ、異なる散乱強度分布を有することが分かった。得られた散乱強度分

布はスパッタリングにより誘起される界面近傍のダメージを反映していると考えられ、UVラマン分光法で得られた結果と概ね一致している。また、温度による CTR 散乱強度分布の変化が小さいことからスパッタリングによるダメージは修復されていないことが考えられる。以上、CTR 散乱強度分布より、Si 基板に直接成長した熱酸化 SiO₂ 膜界面と堆積 SiO₂ 膜界面では異なる温度依存性を有することが示唆された。

【謝辞】本研究は JASRI (課題番号: 2020A1884、2021A1650、2021B1901)の承認、および科研費(20K22418)、JST-CREST(JPMJCR19Q5)の支援により実施した。

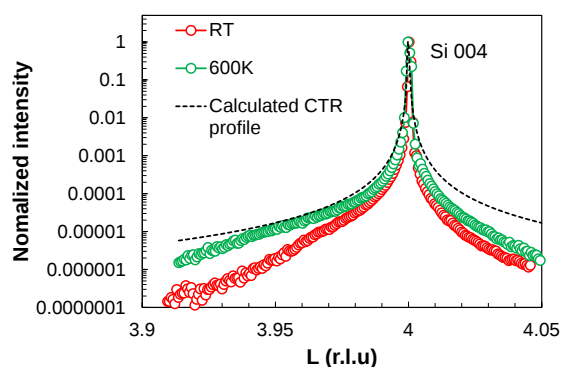


Fig. 1 Normalized CTR profile around Si 004 Bragg peak for thermal SiO₂/Si substrate.

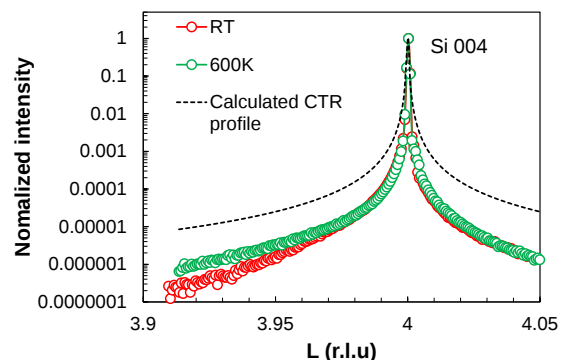


Fig. 2 Normalized CTR profile around Si 004 Bragg peak for sputtered SiO₂/Si substrate.

【参考文献】

- [1] T. Zushi *et al.*, Phys. Rev. B **91**, 115308 (2015).
- [2] I. K. Robinson, Phys. Rev. B **33**, 3830 (1986).
- [3] M. Hattori *et al.*, ECS Trans. **19** (2), 55 (2009).