



Title	走査型トンネル顕微鏡/分光法によるSi(001)洗浄表面に関する研究
Author(s)	有馬, 健太
Citation	大阪大学, 2000, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.11501/3169379
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏名	ありまけんた 有馬健太
博士の専攻分野の名称	博士(工学)
学位記番号	第15416号
学位授与年月日	平成12年3月24日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 工学研究科精密科学専攻
学位論文名	走査型トンネル顕微鏡/分光法によるSi(001)洗浄表面に関する研究
論文審査委員	(主査) 教授 片岡 俊彦 (副査) 教授 芳井 熊安 教授 森田 瑞穂 教授 青野 正和 教授 森 勇藏 教授 広瀬喜久治 教授 梅野 正隆 助教授 遠藤 勝義

論文内容の要旨

本論文は、走査型トンネル顕微鏡/分光法 (Scanning Tunneling Microscopy/Spectroscopy; STM/STS) を用いて湿式洗浄後の Si (001) 表面の構造および吸着金属不純物を原子レベルで観察・評価することを目的として行われたもので、全6章から構成されている。

第1章では、次世代の半導体デバイスの製造を実現するためには、デバイス構築時の初期基板となる洗浄工程後の Si (001) ウェハ表面の構造や吸着物を原子レベルで把握する必要があるという背景を述べている。そして、本研究の目的を明示している。

第2章では、本研究で用いた実験・計算手法について述べている。

第3章では、今日の半導体製造プロセスにおいて極めて一般的に使用されている、希 HF 洗浄後の水素終端化 Si (001) ウェハ表面の原子構造について述べている。まず、STM 観察により、凹凸の大きく従来困難であったこの表面において、明瞭な原子像を得ることに成功している。また、第一原理に基づく量子力学計算によって STM 像のシミュレーションを行い、観察された STM 像が意味する表面原子構造を決定している。

第4章では、半導体製造プロセス中の洗浄工程において、希 HF 洗浄後に薬液除去の目的で行われる超純水リンスに注目し、超純水自身が希 HF 洗浄後の Si (001) ウェハの表面原子構造に与える影響について調べている。赤外吸収分光測定 (FTIR-ATR) や低速電子線回析 (LEED) の結果から、超純水リンス後の水素終端化 Si (001) 表面の原子構造は希 HF 洗浄直後とは大きく異なることを明らかにしている。さらに、STM により明瞭な原子像観察に初めて成功し、〈110〉方向の列状構造が形成されていることを見出している。また、超純水による Si (001) 表面の初期エッチング機構を提案すると同時に、量子力学の第一原理に基づくシミュレーションによって、その妥当性を考察している。

第5章では、清浄な Si (001) 2×1 再構成表面上に Al や Cu を吸着させた時の、吸着金属原子上での局所状態密度を、STM/STS 計測と第一原理シミュレーションから求めている。その結果、シリコン洗浄表面上での金属汚染物の極微量元素分析が可能であることを示唆している。

第6章では、本研究を総括し、得られた成果をまとめている。

論文審査の結果の要旨

本論文は、ULSI (ultra large scale integration) デバイスを構築する際の基板となる湿式洗浄後の Si (001) 表面の構造や吸着金属不純物を、走査型トンネル顕微鏡/分光法により原子レベルで明らかにすることを目的として行われた研究の成果をまとめたもので、その主な成果を要約すると次の通りである。

- (1) 希 HF 洗浄後の水素終端化 Si (001) 表面はマイクロラフネスが大きく、原子レベルで平坦な領域が少ないために、広範囲の STM 観察では原子像を得ることが困難であると指摘している。そして、この表面の一部分を $10 \times 10 \text{ nm}^2$ 程度に拡大して STM 観察を行い、明瞭な原子像を得ることに初めて成功している。さらに、この表面がテラスとステップから構成されていると同時にテラス内部では 1×1 ダイハイドライド構造が形成されていることを明らかにしている。
- (2) 量子力学の第一原理に基づくシミュレーションにより、 1×1 ダイハイドライド構造の全エネルギー計算を行っている。その結果、室温では表面のダイハイドライドが表面垂直方向に対して傾くような振動を行っている可能性があることを示している。さらに、STM 像のシミュレーションを行って、観察された原子像が意味する表面原子構造を決定している。
- (3) 希 HF 洗浄後に超純水リンスを行った Si (001) 表面はやはり水素で終端化されているが、表面原子構造は希 HF 洗浄時とは大きく異なることを、FTIR-ATR や LEED により示している。また、STM 観察により $\langle 110 \rangle$ 方向の列状構造が形成されていることを明らかにしている。さらに、原子像観察に成功し、この列状構造が主として 2×1 構造により形成されていることを確認している。
- (4) これらの列状構造は、Si (001) ウエハ表面が超純水により少量エッチングされた結果生じることを見出している。すなわち、希 HF 洗浄後に形成される 1×1 ダイハイドライド構造を持つテラス内部において、隣り合うダイハイドライドの H 原子間に働くクーロン斥力を緩和するために、ダイハイドライド列が超純水中で一例おきに優先的にエッチングされた結果、 2×1 構造が形成されると提案している。また、量子力学の第一原理に基づくシミュレーションから、提案したエッチング機構の妥当性を証明している。
- (5) 超高真空中で加熱により作製した Si (001) 2×1 再構成表面、およびその上に Al や Cu 原子を吸着させた時の STM/STS 計測を行っている。その結果、清浄な Si ダイマー上および吸着 Al ダイマー上、Cu 原子上で局所状態密度がお互いに大きく異なることを明らかにしている。
- (6) STM/STS 計測結果に対応する表面構造をモデル化して、それぞれの場合における局所状態密度をシミュレーションしている。その結果、定性的ではあるが実験結果を再現したシミュレーション結果を得ている。これらに基づき、Si (001) 洗浄表面上での金属汚染物の極微量元素分析法を提案している。

以上のように本論文は、ULSI を構築する際の基板となる Si (001) 洗浄表面において、その構造および吸着金属不純物を原子レベルで理解するための有益な基礎的知見を与えている。さらに、超高真空中でのみ作製、維持が可能な理想表面とは対極に位置して、従来困難であると考えられてきた実用表面の原子レベルでの観察・評価に道を拓いたもので、精密科学および表面科学、半導体工学の発展に寄与するところが大きい。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。