コンピュータシミュレーションによる 半導体の電界イオン像*

橋本 純子**・酒井 明**・神保 明子**・桜井 利夫**

(昭和59年12月13日 受理)

Computer Simulation of Semiconductor Field Ion Images

Junko HASHIMOTO, Akira SAKAI,
Akiko JIMBO and Toshio SAKURAI

(The Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo 7-22-1,
Roppongi, minato-ku, Tokyo 106)

(Received December 13, 1984)

Field-ion microscopy of semiconductores is now becoming a popular research project in many laboratories. However, it is still not easy to get good field-ion images (FI images) of semiconductores and to interpret the observed images. We present here some computer simulations of the field-ion images of Si obtained by using a low-cost microcomputer. Using the conventional thin shell method for image formation, FI images of Si tips oriented along $[111]$, $[110]$ and $[100]$ directions were simulated and compared with the experimental FI images. A good agreement was obtained in the case of the $[111]$ oriented tip surface, while in other cases a detailed comparison was found to be difficult because of the lack of sufficient resolution in the observed FI images. This work can be extended and applied to the study of metal-semiconductor interfaces.

1. はじめに

従来、半導体の“電界イオン像 (Field Ion Image-FI 像と略す)”の観測は、金属に比べて困難であった。しかし最近、超高真空 ($\sim 10^{-9}$ Pa ($\sim 10^{-11}$ Torr)) が可能になったこと、試料温度を液体窒素温度より更に低い温度迄冷却することが容易になったこと、又良い試料が作られるようになったこと等のために、Si や GaAs の清浄面の FI 像が比較的容易に得られるようになった¹⁾。そこでこの報告では実験で観察された半導体の FI 像を手軽なマイクロコンピュータを用いてシミュレートした像とを比較検討する。

2. 計算手順

従来行なわれているように²⁾、FI 試料先端の観測され

る部分の形状を半径 r_0 の半球と仮定し、厚さ d の半球と仮定し、厚さ d の球殻の層中にある原子のみが FI 像に寄与するとする。(Fig. 1)

いま、(100)面から見た Si の結晶格子構造を Fig. 2 に示す。

Fig. 2 から明らかなように Si 等のダイヤモンド構造の (100)面は 4 枚周期の積層になっている。これに注目し、第 1 層の中心を原点にとり、Z 軸を各層に垂直にとる。また、Fig. 3 のように基本ベクトルをとり、第 1 層、第 2 層、第 3 層、第 4 層の原子の X, Y 座標を並進ベクトルを単位として表わすと、

第 1 層 $(X, Y) = (2m, 2n)$ m, n : 整数 0, 1, 2, ...

第 2 層 $(X, Y) = (2m, 2n-1)$

第 3 層 $(X, Y) = (2m-1, 2n-1)$

第 4 層 $(X, Y) = (2m-1, 2n)$

となる。各々の層の間隔は $a/4$ である。(a は格子定数) から、これから Z 座標も求まり、原点からの距離 r が計

* 昭和59年3月31日 第31回応用物理学関係連合講演

** 東京大学物性研究所 (港区六本木 7-22-1)

Fig. 1 A schematic drawing of a tip used in the field-ion microscope. In the thin shell model, the shape of the tip is approximated by a hemisphere of radius r_0 . It is also assumed that only those atoms which reside within a thin shell of thickness d contribute to the field-ion image.

Fig. 2 Atomic structure of the (100) surface of Si.

算出来る。次に球殻 ($r_0 < r < r_0 + d$) に入る格子位置の x, y 座標 (m, n) のとり得る範囲を指定し、各原子面について球殻に入る位置を求める。最後に投影中心を球面上の任意点におき、ステレオ投影を行う。

Fig. 4 は Si の [001] 軸を中心としたコンピュータシミュレーションによる FI 像である。ここで用いたパラメータは、 $r_0 = 400 \text{ \AA}$, $d = 0.25 \text{ \AA}$, $a = 5.43 \text{ \AA}$ である (ドット数 = 12660, ステップ数 = 106)

同様に [111], [110] 軸を中心とした FI 像を Fig. 6a, Fig. 7a に示す。 (Fig. 6, 7 において a はコンピュー

Fig. 3 Definitions of the x and y coordinates and the unit vectors on the (100) surface.

Fig. 4 A simulated FI image of the [100] oriented Si tip using the following parameters: $r_0 = 400 \text{ \AA}$, $d = 0.25 \text{ \AA}$ and the lattice constant $a = 5.43 \text{ \AA}$.

タシミュレーションによる FI 像, b は実験の FI 像を表わしている)

次に当研究室で観察された FI 像と、コンピュータシミュレーションによる像とを比較する。比較するにあたり、観察された Si の FI 像がどのような条件で得られたか、以下に述べてみる。

3. FI 像の観察方法と写真の説明

[111] 軸中心の Fig. 5, Fig. 6b は、この研究用に特別に CVD 法で作った Si ウィスカーを使用して得られた

Fig. 5 a) to d): a series of experimentally observed FI images of the $[111]$ oriented Si tip under various imaging conditions.

FI 像である。又 $[110]$ 軸中心の Fig. 7b, $[001]$ 軸中心の Fig. 8b の場合には商業用ウェファァーから棒状に切り出したものを試料として使用した。実験手順は、 $\text{HF} + \text{HNO}_3$ による化学研磨で先端を尖らせた試料を、超高真空電界イオン顕微鏡に導入し、 4×10^{-11} Torr に排気する。閉サイクルヘリウム冷凍機を用いて試料を $\sim 30\text{K}$ 迄冷却した後に、水素ガス (1×10^{-4} Torr) を導入し、試料電圧を上げて FI 像を観測し清浄面を得る。まず表面の酸化層が電界蒸発した後、下地の清浄面が現われてくる。この酸化層の除去には、かなり高い水素ガス圧が必要であり $\sim 10^{-3}$ Torr 程度の水素ガスの存在で酸化層を電界蒸発させた。このような酸化層の出来やすい Si の FI 像を得るためには超高真空は必須であり、当研究室の装置の到達真空が 10^{-11} Torr 台になっていることが良い FI 像が得られた 1 つの要因と考えられる。

Fig. 5 の 4 枚の写真は $[111]$ 軸中心の FI 像を、電界及び水素ガス圧を変化させて撮ったものである。FI 像の観測中にも水素化物イオンとして電界蒸発する過程が起きているので、リング構造をとらえるには、露出時間は、 $1/100$ sec 程度より速くなければいけない。実験には、

直径 5 インチのチャンネルプレートを使用しているので、拡大率を減少させることなしに、 (111) から $(\bar{1}\bar{1}1)$ 面まで $\pm 70^\circ 32'$ の角度範囲を観測することが出来る。

Fig. 5a では (111) から $(\bar{1}\bar{1}1)$ の間に並んだ (122) , (133) , (011) , $(\bar{1}55)$, $(\bar{1}33)$, $(\bar{1}22)$, の各面がはっきり写っているのが見られる。Fig. 5b はさらに水素ガスを 1×10^{-3} Torr 程度まで上げて撮ったものである。このようにすると、水素によって電界蒸発が促進され (hydrogen promoted evaporation) 非常に速い電界蒸発がおこる。この結果として試料先端が特有の多面体形状 (polygon shape) を示すことが明暗からわかる。

Fig. 5C では少し電界を上げると中心の (111) 面には、水素ガス供給が出来なくなるため暗くなることが像からわかる。

Fig. 5d は、このような高い電界の下で水素ガス圧を 10^{-6} Torr まで下げた時の FI 像であり、この場合電界蒸発は遅くなり、安定な FI 像が得られている。このような電界の高い状態では (111) 面のリングの見え方はやや悪くなるが新たに (113) , (110) 面等が見えるようになる。このように Si の FI 像は、電界、水素ガス圧等を制

Fig. 6 A simulated FI images of the $[111]$ oriented Si tip (a), and the corresponding experimental FI image (b) observed at $V_{\text{tip}} \sim 5$ kV $T_{\text{tip}} \sim 30$ K and $p_{\text{H}_2} \sim 10^{-4}$ Torr (V_{tip} and T_{tip} denote the tip voltage and the tip temperature, respectively, and the p_{H_2} is the pressure of the hydrogen imaging gas.). A good agreement can be seen between the images of a) and b).

御し、電界蒸発状態を調節することにより、かなりはっきりした FI 像を得ることが出来る。

4. 実験とシミュレーションとの比較

Fig. 6 は $[111]$ 軸中心の FI 像の比較である。同図 b) の観察像の場合、チップ半径 r_0 は、約 $370 \text{ \AA}$ と評価されるので、同図 a) のシミュレーションは $r_0 = 400 \text{ \AA}$, $d = 0.25 \text{ \AA}$, $a = 5.43 \text{ \AA}$ で行った。両者を比較するとかなり一致していると言える。3 回対称がよくわかり、 $(\bar{1}\bar{1}1)$, $(1\bar{1}1)$, $(11\bar{1})$ と (011) , (101) , (110) 面の他に $(\bar{1}\bar{3}3)$, (113) 面も、はっきりみることが出来る。ただ実験の FI 像はコンピュータシミュレーション程にはリング構造が見えていない。これは 1 つには実験では水素との反応によ

Fig. 7 Same as Fig. 6 but for the $[100]$ oriented tip of Si. The imaging conditions in b) are $V_{\text{tip}} = 20.7$ kV, $T_{\text{tip}} \sim 30$ K and $p_{\text{H}_2} \sim 10^{-4}$ Torr.

り、絶えず表面が変化していて安定な表面を得ることが難しいと考えられる。

Fig. 7b, **Fig. 8b** は、それぞれ $[110]$ 軸中心, $[001]$ 軸中心の FI 像の観察結果であるが、これらを $[111]$ 軸中心の Fig. 5b) に比べるとかなり質が落ち低指数面がはつきりでていない。これは $[110]$, $[001]$ 軸中心の FI 像は写真にとらえることがかなりむずかしく、質が悪いのは面の安定性、各面の水素との反応性等が関係しているためと考えられる。

それでも Fig. 7b は 4 回対称であること。 (110) , (111) , $(11\bar{1})$ 面とわずかに $(10\bar{1})$, $(01\bar{1})$, 面が読みとれる。又、像の明るさから晶帯は読むことが出来る。Fig. 8b は、 (001) がわずかながらもリングとしてとらえることが出来、 $(\bar{1}\bar{1}1)$, $(1\bar{1}1)$, (111) , $(\bar{1}11)$ の明るい所がわかる。 $[110]$, $[100]$ 軸中心の場合、実験で得られた FI 像は、質が悪く、格子面があまり観測できず、半径の評価が難しい。結像電圧からの評価も金属と異なりあまり正確でないため、コンピュータシミュレーションでは詳しい比較は試みず、 $[111]$ 軸中心のパラメーターをそのまま用いて Fig. 7a, Fig. 8a とした。