

ベイズ推定による酸化シリコン表面の Si 2p XPS 解析

Bayesian Estimation for Analyzing Si 2p XPS of Oxidized Silicon Surfaces

NIMS¹, 日大², 原子力機構³ ○篠塚 寛志¹, 永田 賢二¹, 吉川 英樹¹, 小川 修一², 吉越 章隆³

NIMS¹, Nihon Univ.², JAEA³, °Hiroshi Shinotsuka¹, Kenji Nagata¹, Hideki Yoshikawa¹, Shuichi Ogawa², Akitaka Yoshigoe³

E-mail: SHINOTSUKA.Hiroshi@nims.go.jp

X線光電子分光法 (XPS) は、物質表面の化学状態に関する情報を提供する強力な計測手法として広く用いられている。酸化シリコンはゲート絶縁膜として重要な役割を果たしており、その特性を正確に理解することがデバイス性能や信頼性向上において不可欠である。放射光を用いた高分解能の Si2p 光電子スペクトルの測定および解析により、シリコンの初期酸化過程において Si(001)の表面二量体の存在や酸化物/Si 界面の酸化誘起歪みに起因する成分の存在が強く示唆されている[1]。しかしながらその評価には、光電子スペクトルの信号が出現する場所などの事前情報が必要で、その事前情報の場所からのズレやピークの重なりを分離して議論するためには膨大な時間と解析経験が必要であった。

本研究ではシリコンの酸化プロセス中にリアルタイムで計測した Si2p スペクトルを数理学におけるベイズ推定の手法で解析し、その結果、熟練者と同等の解析を自動化することに成功した[2]。解析の結果は、初期値や設定条件に強く依存する従来手法とは異なり、局所解に陥るリスクを軽減し、グローバルな最適解を探索することが可能である。また、スペクトルに含まれるピークの数データをデータから直接推定することができ、さらに各ピークの位置や形状も事後分布として得ることができる。これにより、図 1 のようにシリコンの酸化の時系列に沿って各ピーク成分の変化を明瞭に観察することができた。

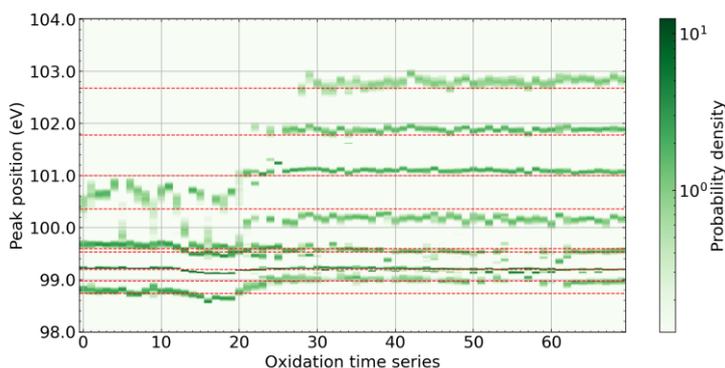


図 1. シリコン酸化の時系列に対するピーク位置の事後確率分布。赤い点線は代表的なピーク位置[1]。

[1] S. Ogawa *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. 52 (2013) 110128.

[2] H. Shinotsuka *et al.*, Applied Surface Science 685 (2024) 162001.