

Development of Analytical Instruments
for 3D Atomic Structure Determination of
Surface and Interface by Photoelectron Spectro-Holography

光電子スペクトロホログラフィーによる
原子レベルでの表面・界面 3 次元構造評価装置の開発

プロジェクトリーダー 二 瓶 好 正

東京大学 生産技術研究所 教授



図 1：多波長 X 線発生装置外観

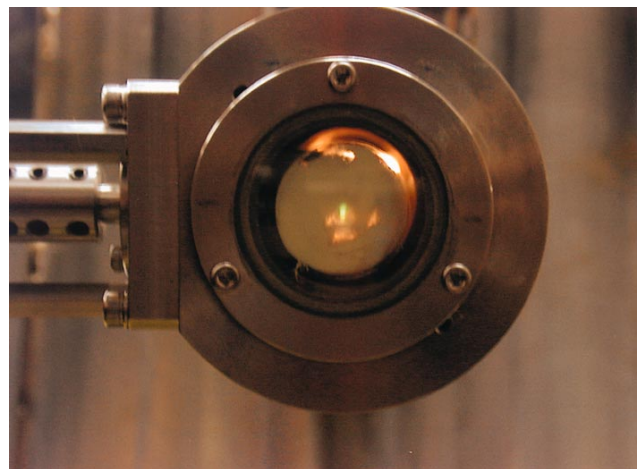


図 2：多波長 X 線発生装置による発生 X 線
(Al-Ka 線) のスポット (中央緑の蛍光部)
スポットサイズ 0.6mm × 3.5mm

1. 研究の目的

コンピューターを始めとする電子機器の小型化・軽量化・高性能化、DVD や MD などの記憶媒体の高密度化は、そこに用いられている電子デバイスや薄膜材料の微小化・微細化・薄膜化によって達成されています。今後、このようなものの製造技術はさらに小さく細く薄いものを創る方向に進むのは明らかですが、一方製造されたものを評価する技術はどうでしょうか？

このような微細なものの構造を知る手段として、電子顕微鏡や走査トンネル顕微鏡などの手法があり、原子の 1 つ 1 つまで見ることが可能です。ところがこれらの手法で調べることができるのは、原子レベルで極薄く加工した試料や最表面から 1 ないし 2 原子層程度の領域に限られるのが現状です。またこれらの手法では構造は比較的簡単にわかるものの、元素の識別や化学結合状態について知るのは困難です。私達の研究のメインに据えている光電子回折・光電子ホログラフィーの手法は、構造と状態を同時により詳細に把握することのできるユニークな手法です。またこの手法では表面から数十原子層程度のより深い領域までの構造・状態を知ることができます。

ただいくら便利な手法が開発されても、各自が一から装置を造らなければならないなら評価法としての便利さは生じません。そこで今回の研究では手法の開発と同時にその装置化・製品化も目指しています。現場レベルでも使用できるように装置化できれば、微細構造の評価がより迅速になり、評価技術の進歩だけでなく、それに伴う製造技術のさらなる発展も期待できます。このように分析手法・評価技術の開発・装置化はその分野のみではなく、関連する各分野への大きな波及効果が期待できるものです。



図 3：研究風景

2. 研究の内容

私達の研究の目的は、

(1) 光電子回折・ホログラフィーによる原子レベルでの構造解析法の開発
(2) 3次元原子レベル構造解析のための分析手法の装置化
(3) 光電子回折・ホログラフィーのシミュレーションアルゴリズムの開発
にあります。したがって、他の研究と比べると市販装置を購入するのではなく、私達自身で新しい技術や装置を開発することに重点が置かれています。正確かつ多様な信号(光電子)を得るための強力な光源系、微小な信号を効率よく得るためのアナライザー系、データから原子構造を得るためのシミュレーションアルゴリズム、以上の3つの要素技術の開発・装置化と、それを評価・支援するための周辺技術の開発を中心に行っています。

1. 多波長・多領域強力X線光源の開発・装置化

いくつかのエネルギーの強力なX線を同時に用いて光電子をいろいろな側面から捉えるために、多波長と多領域の2つの観点から、日本の誇る回転対陰極技術を用いた新たな強力X線光源の開発を行なっています。多波長光源では、普段よく使われる1000eV程度の励起X線のエネルギーを数十%程度変え、同じ光電子回折現象を多角的に捉えて構造をより鮮明に精密に捉えることを意図しています。

一方、多領域光源では1000eVに対して100、10000eVと桁を変えることで全く異なった物理現象から構造を導き出すことを目指しています。いわば多波長光源では視点を少しずらして物を立体的に捉えようとするのに対して、多領域光源では全く別の見方から物を捉えようとするのに対応します。現在、多波長光源を製作して基礎実験を行っており、多領域光源についても装置化を進めています。

2. 大口径・高角度分解能アナライザーの開発・装置化

薄膜などから放出された光電子の角度分布を精密に測定することで光電子回折の情報が得られます。従来の測定では、光電子の取込口に細い筒を束ねて並べて取込角を立体的に制限していました。ところがこの方法では筒の壁などにより多くの光電子が取り込めず、高角度分解能測定の際のロス是非常に大きくなります。

そこで立体的な角度制限ではなく、全く新しい観点から電子光学的に角度制限を行なえる大口径・高角度分解能の電子レンズを私達は独自に開発しました。また多領域光源の高エネルギーの光電子も測定できるようにアナライザー系の高耐電圧化も同時に行ないました。現在、これらを組合わせた測定システムを製作しており、これにより多様なエネルギーの光電子回折をロスなく高精度で測定できます。

3. 3次元原子像再構成アルゴリズムの開発・プログラミング化

光電子回折・ホログラフィーでは状態別に原子レベルの構造を3次元で捉えることが可能なユニークな手法ですが、パターンを見ただけでは原子並びの方向など簡単なことしか分かりません。そこで得られたパターンから3次元原子像を導き出すためのアルゴリズム・プログラムが必要となります。現在はテンソル解析を用いた解析法や異なる光電子エネルギーのパターンの差を取る解析法などの開発・プログラミングを行なっています。

私達はこの他にも周辺技術として、測定対象の薄膜を精密に製作するための技術・装置や、電子素子の分析のための収束イオンビームによる精密加工技術などの開発も同時に行なっています。

3. 研究体制等

期 間：1998年6月～2003年3月

構 成：プロジェクトリーダー1名、コアメンバー3名、研究分担者9名(内
ポストドク2名)、研究協力者11名

実施場所：東京大学生産技術研究所

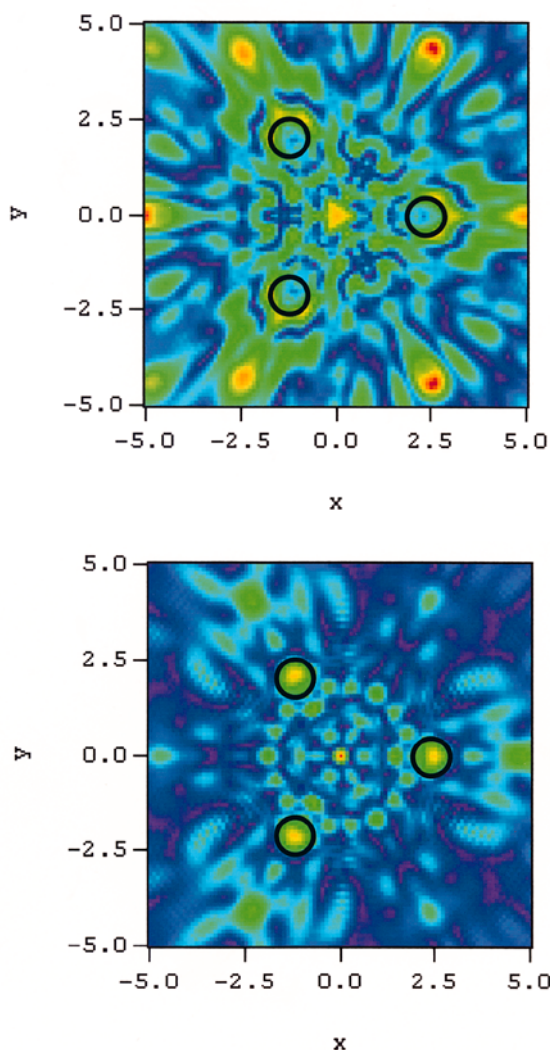


図4：光電子ホログラフィーによる3次元原子像再構成の理論的検討結果

(a) 試料のフッ化ストロンチウム SrF₂ の構造モデル

(b) 従来のホログラフィー解析

(c) 差分ホログラフィー

○はSr原子の本来ある位置差分ホログラフィーでは原子位置が正確に再構成されています