

小角散乱

GISAXS 強度解析における Ge ナノドット試料の表界面の影響

奥田浩司、加藤真行、久野啓志、落合庄治郎（京都大学工学研究科）

GISAXS 法は基板上的のナノドット単層の形状やサイズを評価することのできる、表面敏感な構造評価手法であることが知られている。GISAXS 法が表面の直接観察手法である SPM や SEM と比較して有用な点は、キャップ層により被覆されている場合でも内部構造を知ることができるという点にある。キャップ層による被覆に伴って起こる構造変化のうち、実質的に最も重要なものはキャップ層の成長中の相互拡散による、ナノドットの組成変化や界面拡散である。このような相互拡散による界面濃度勾配の形成に対応する小角散乱強度については、従来のバルク材料では高角のべき乗則の Porod 則からのずれが調べられている。GISAXS においても、ボルン近似の枠内では同様の考え方で議論することが可能であるが、実際には多重反射を含んだ散乱強度でどのような影響が現れるかは明確ではない。Si 基板上に Si キャップ層を持つ Ge ナノドット層を成長させた試料について、BL15A における測定で得られた GISAXS の結果を、反射率とシミュレーションの結果を組み合わせで解析した。バルク材料でのべき乗則は界面がシャープでなくなることによって勾配が変化するが、薄膜の GISAXS では動力学補正を考慮した場合、それ以外に基板、ウェットティングレイヤーや保護膜表面層などの粗さがどのように影響するかを考慮する必要が生じる可能性がある。今回反射率解析で得られる表面、界面ラフネスが DWBA による GISAXS 強度に与える影響を、実測試料のパラメータを中心としてシミュレーションと比較することによって検討した。DWBA の計算には反射率の最小 2 乗フィッティングから得られた各層の厚さとラフネスパラメータを標準入力とし、モデル構造としては基板上にナノドット層、キャップ層を仮定し、多層膜の光学理論によって計算した電場強度を DWBA を用いた GISAXS 強度計算に利用した。得られた結果は、比較的 z 方向（基板垂直方向）高さの小さなナノドット構造の場合には Yoneda 線近傍を除けばボルン近似のみでかなりよい精度の近似が可能であることを示した。一方、比較的 z 方向の大きさがある場合、あるいは視斜角の小さな条件では DWBA による補正が無視できない効果を持つこと、一方でべき乗則成分に界面ラフネスの効果が影響するような q 領域では、摂動成分が特徴的なべき乗則を持つものの、摂動成分の絶対値は全散乱強度と比較して小さいことがわかった。