

# 半導体ウエハや金属ナノ粒子の結晶性の評価

Keywords: 高輝度シンクロtronX線、回折、材料の機能と構造品質

高輝度放射光ステーション ステーション長

坂田 修身

SAKATA.Osami@nims.go.jp | [https://samurai.nims.go.jp/profiles/sakata\\_osami?locale=ja](https://samurai.nims.go.jp/profiles/sakata_osami?locale=ja)



## 研究の背景

- 材料の新規開発・創製には、構造や電子状態の解析・評価、物性測定、理論計算が有機的に連携することが重要である。
- 高輝度シンクロtronX線を利活用した原子配列、電子状態・構造の解析・評価から材料創製に貢献する。

## 研究の狙い

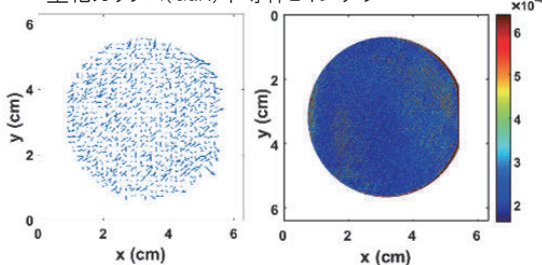
- 半導体ウエハの結晶品質を評価するための新しい解析方法を開発し、局所的な結晶面の曲がりやを数10ミクロンの分解能で可視化すること。
- グリーン・環境触媒である金属ナノ粒子の構造と触媒機能との相関関係を見出すこと。

## 最先端研究トピックス

回折X線トポグラフ解析から、半導体ウエハ全面の“格子面の局所的な曲がり分布”を可視化

・従来のX線回折を用いた結晶面（格子面）を数10ミクロンの分解能で評価するには、入射ビームサイズを小さくする必要があるため、ウエハ全面の測定に時間を要する欠点があった。  
 ・ウエハ全面にX線を照射し、結晶面を一度に測定する方法では、局所的な結晶面の方向など詳細な情報はこれまで得られていなかった。

窒化ガリウム(GaN)半導体2インチウエハ



格子面法線ベクトルの表面内成分

格子面法線ベクトル(単位長さ)の絶対値の表面内成分

ルテニウム(Ru)ナノ粒子の原子配列構造と触媒活性との関連を見出す

・高いCO酸化触媒活性を持つルテニウム(Ru)ナノ粒子のわずかな構造の違いが、触媒機能に影響する可能性を明らかにした。局所的な原子スケールの構造と平均構造の両方を数値化することで実現した。  
 ・数ナノメートルのサイズの金属ナノ粒子を高エネルギーX線回折で調べ、2体分布関数、逆モンテカルモデリングにより原子配列構造を、またリートベルト法により平均構造を、解析、評価した。

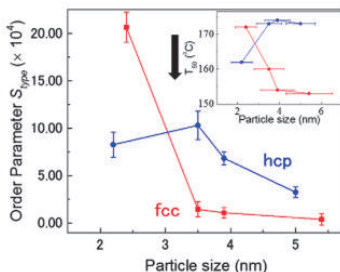


図: fccタイプのRuナノ粒子とhcpタイプのRuナノ粒子の提案した構造秩序パラメータのナノ粒子のサイズとの関係。挿入図は粒子サイズによるCO触媒活性の変化を示す。

触媒活性の尺度である $T_{50}$ はCOの反応率が50%に達する温度を示すので、 $T_{50}$ が低いほど高い触媒活性を持っていることを示す。

## 文献

- ・結晶格子面分布測定方法 特願2018-83268
- ・Appl. Phys. Express **11**, 081002 (2018).

## 文献

- ・Phys. Chem. Chem. Phys. **18**, 30622 (2016).
- ・Sci. Rep. **6**, 31400 (2016).

## まとめ

- ウエハ全面に対し一度に、しかも数10マイクロメートルの空間分解能で、GaN半導体の直径2インチウエハ結晶面（格子面）の「ゆがみ」を可視化する新たな評価手法を開発した。
- 数ナノメートルのサイズの金属Ruナノ粒子の局所構造と全体の平均構造を調べ、触媒活性との関係を調べた。

## 実用化への目標

- 材料の機能(たとえば触媒活性や水素吸蔵特性)とより関係づけられるよう、金属ナノ粒子の原子配列構造や電子状態を議論できるデータを得るためのシンクロtronX線の技術や解析法を開発すること。