



## LOGITを用いた Auger Depth Profile データの処理

荻原俊弥

(株) ジャパンエナジー分析センター

〒335-8503 埼玉県戸田市新曽南3-17-35

E-mail: togiwara@lab.j-energy.co.jp

(1998年4月30日受理)

LOGITを用いたオージェデプスプロファイルデータの処理について概説する。特に界面プロファイルについて、実測のプロファイルのフィッティング事例、パラメータを用いた解析について紹介する。

### Analysis of Auger Depth Profiles with LOGIT.

T. OGIWARA

Japan Energy Analytical Research Center Co., LTD.

3-17-35, Niizo-Minami, Toda-shi, Saitama 335-8503

(Received April 30 1998)

This paper describes the treatment of the Auger depth profile data using LOGIT program. Some examples of the curve fitting with LOGIT and the analysis of parameters determined from LOGIT were described.

#### 1 はじめに

NISTのJ.Fineらが提唱するLogistic function<sup>1)</sup> (プログラム名: LOGIT)を用いたオージェデプスプロファイルのデータ処理について概説する。この関数は深さ方向分析の標準試料であるNi/Cr多層膜のデプスプロファイルの解析に用いられた経験式である。もともとは人口増加の予測のために開発されたベルハルストのロジスティック方程式が起源である<sup>2)</sup>。人口論の方程式としては問題があったが、実験室で飼われる生物の増殖とこのモデルが良く一致することから生物学の分野で使われてきた。

これまで、筆者らが各種多層膜のオージェデプスプロファイルをLogistic functionを用いて解析した結果、形状を問わず界面プロファイルを良くフィッティングでき、さらにパラメータと深さ分解

能を規定する要因との関係が明らかになりつつある<sup>3)</sup>。今後、デプスプロファイルを定量的に評価する上では有効な関数の一つと考えられる。

ここでは、LOGITプログラムの入力フォーム、実測のデプスプロファイルのフィッティング事例およびフィッティングパラメータとデプスプロファイルの形状との関係について紹介する。

#### 2 Logistic function

フィッティング関数 Logistic function は次式で表される。

$$Y = \frac{A + As(X-X_0) + Aq(X-X_0)^2}{1 + e^Z} + \frac{B + Bs(X-X_0) + Bq(X-X_0)^2}{1 + e^{-Z}}$$

$$Z = (X-X_0) / D$$

$$D = 2 D_0 / [1 + e^{Q(X-X_0)}]$$

ここで、Yは深さXにおける強度、A, Bは濃度100%または0%レベルの強度、As, Bs, Aq, Bqは100%または0%レベルの傾き、 $X_0$ は界面における中点、 $D_0$ は界面幅、Qは非対称性項である。

### 3 界面プロファイルのフィッティング

現在、LOGITプログラムはMS-DOS汎用である。そのため、デプスプロファイルデータをオージェのコンピュータから処理先のコンピュータへ転送している。

ファイルの形式は図1に示すように、1行目がコメント、2行目以降はスパッタリング時間(X)と強度(Y)の組データであり、データの区切りはタブ、スペース、コンマのいずれも処理できる。また、フィッティングは1界面毎である。そこで、転送した複数の界面を持つデプスプロファイルデータを、1界面毎のテキストファイルに変換している。

```
File: NiLMM.dat, Zalar, 1kV, Interface1
1005      108
1020      79
1035      161
1050      112
1065      103
1080      132
1095      128
1110      122
1125      113
1140      207
1155      116
1170      78
1185      108
:
:
:
:
:
```

図1 ファイルの形式

```
NATIONAL BUREAU OF STANDARDS
LOGISTIC CURVE FITTING PROGRAM, VERSION 6/10/86

RECONFIGURE      - Y/N? [N]

FINAL RESULTS OF ANALYSIS DIRECTED TO:
[1] CONSOLE
[2] PRINTER
[3] RESULTS FILE
[4] SESSION.LOG FILE
[5] USER FILE
WHICH? ENTER NUMBER 1 -> 5 [5]

INTERMEDIATE RESULTS OF ANALYSIS DIRECTED TO:
[1] CONSOLE
[2] PRINTER
[3] RESULTS FILE
[4] SESSION.LOG FILE
[5] USER FILE
WHICH? ENTER NUMBER 1 -> 5 [5]

IDENTIFY DATA TYPE:
[1] X AND Y
[2] SEVERAL Y'S, TAKING RATIOS
[3] X, Y, AND WEIGHTS
WHICH? ENTER NUMBER 1 -> 3 [1]

LOCK OPTIONS      - Y/N? [N]

AUTOSAVE DATA FOR PLOTTING      - Y/N? [N]

SELECT PARAMETERS TO BE VARIED      - Y/N? [N]
ALLOW A TO VARY      - Y/N? [Y]
ALLOW B TO VARY      - Y/N? [Y]
ALLOW X0 TO VARY      - Y/N? [Y]
ALLOW D0 TO VARY      - Y/N? [Y]
ALLOW AS TO VARY      - Y/N? [Y]
ALLOW BS TO VARY      - Y/N? [Y]
ALLOW AQ TO VARY      - Y/N? [Y]
ALLOW BQ TO VARY      - Y/N? [Y]
ALLOW Q TO VARY      - Y/N? [Y]

SELECT POST-FITTING TESTS?      - Y/N? [N]
INCLUDE CONVERGENCE TEST      - Y/N? [Y]
INCLUDE INTERVAL TEST      - Y/N? [Y]
INCLUDE UNCERTAINTY TEST      - Y/N? [Y]
INCLUDE ASYMPTOTE TEST      - Y/N? [Y]

IDENTIFY AND REJECT OUTLIERS      - Y/N? [N]
OUTLIER REJECTION VALUE:      [4.00]
MAX. NO. OF RETRIES:          [0]

ENTER NUMBER OF ITERATIONS / CYCLE: [11]

*** FINISHED WITH CONFIGURATION OPTIONS ***

SAVE THE OPTIONS AS DEFAULTS      - Y/N? [N]

ENTER NAME OF RESULTS FILE [RESULTS]: NiLMM.LGT

ENTER DATA FILE NAME: NiLMM.dat

*** PLEASE WAIT ***

ITERATION NUMBER: 1 2 3 4 5

END ANALYSIS AT 10:01:47.98

END OF ANALYSIS FOR DATA FILE: NiLMM.dat

ENTER ANOTHER FILE      - Y/N? [N]
```

図2 LOGIT プログラムの入力フォーム

LOGIT.EXEを実行すると、対話形式で条件を入力できる。入力フォームは図2の通りである。実際に、Ni/Cr多層膜のオージェデプスプロファイルについて、表面から53nmの界面プロファイルをフィッティングした結果を図3に示す。フィッティング結果として、スパッタリング時間毎に実測値、計算値、その差、標準誤差、界面のデータが表示される。また、

最終的に決定した各パラメータの値、標準偏差、90%-10%界面幅に相当するX:スパッタリング時間等が示される。

図4はNi/Cr, GaAs/AlAs, InP/GaInAsPの各多層膜の界面プロファイルをカーブフィッティングした結果である。多層膜毎に界面プロファイルの形状は異なっているが、Logistic functionは形状を問わず良くフィッティングできることがわかる。

NATIONAL BUREAU OF STANDARDS  
LOGISTIC CURVE FITTING PROGRAM, VERSION 6/10/86

X(OBS)	Y(OBS)	Y(CALC)	DIFF	STANDARD RESIDUALS	
22.500	967.	933.	34.	0.6	24
22.750	1239.	1258.	-19.	-0.4	30
23.000	1712.	1640.	72.	1.4	39
23.250	2030.	2067.	-37.	-0.7	46
23.500	2521.	2515.	6.	0.1	42
23.750	2934.	2956.	-22.	-0.4	35
24.000	3342.	3365.	-23.	-0.4	28
24.250	3795.	3725.	70.	1.3	20
24.500	3992.	4025.	-33.	-0.6	16
24.750	4253.	4266.	-13.	-0.2	12
25.000	4413.	4451.	-38.	-0.7	9
25.250	4621.	4590.	31.	0.6	5
25.500	4724.	4692.	32.	0.6	4
25.750	4829.	4764.	65.	1.2	2

CYCLE 1 ITERATION NO. 5

A = -740. +/- 1153. ( 145. 3)  
 B = 5042. +/- 174. ( 4885. 3)  
 X0 = 23.30 +/- 0.36 ( 23.51 3)  
 D0 = 0.733 +/- 0.084 ( 0.713 3)  
 AS = -344. +/- 550. ( 0.0 3)  
 BS = -41. +/- 48. ( 0.0 3)  
 AQ = -34. +/- 68. ( 0.0 3)  
 BQ = 2.3 +/- 3.1 ( 0.0 3)  
 Q = 0.04 +/- 0.16 ( 0.0 3)

64 DATA POINTS, 24 IN THE INTERVAL  
 STANDARD DEVIATION = 59.4 ( 59.4)  
 RELATIVE DEVIATION = 2.76%  
 GRAM DETERMINANT = 0.212215E-09

AT X = 21.63 TRANSITION IS 8.4% COMPLETE  
 AT X = 24.86 TRANSITION IS 89.9% COMPLETE  
 RANGE = 3.22 +/- 0.40  
 ETA = 0.0332 +/- 0.1292  
 Q\*D0 = 0.0303 +/- 0.1193

図3 Logistic function による界面プロファイルのフィッティング結果

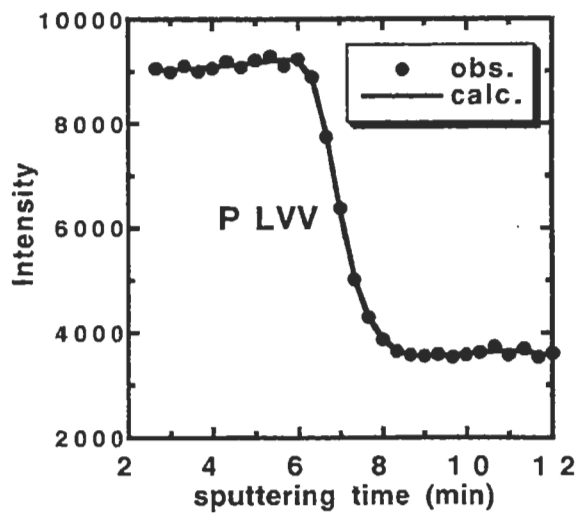
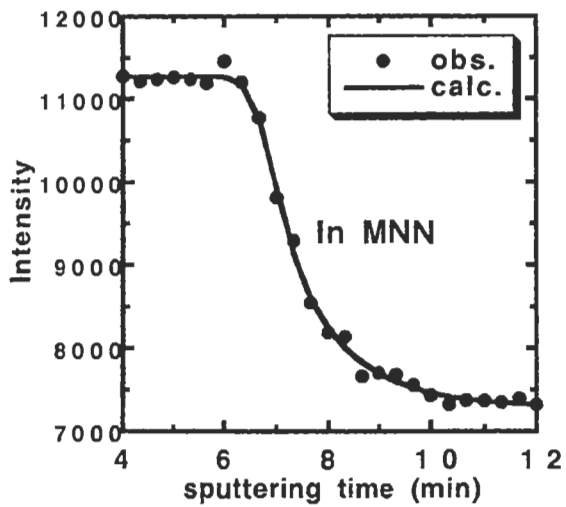
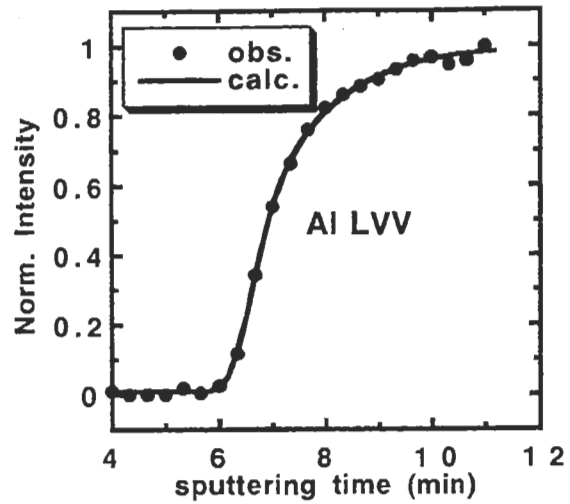
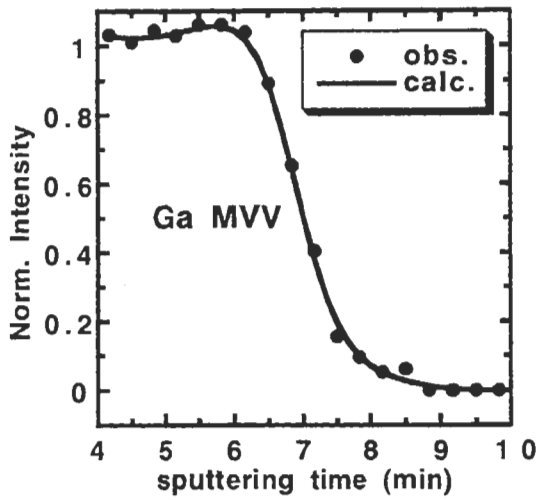
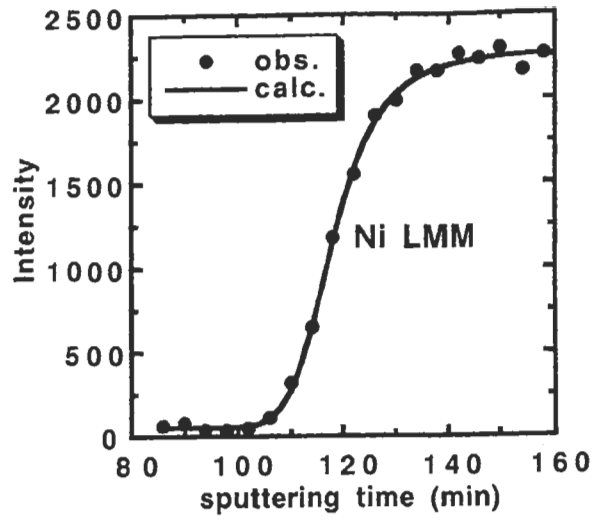
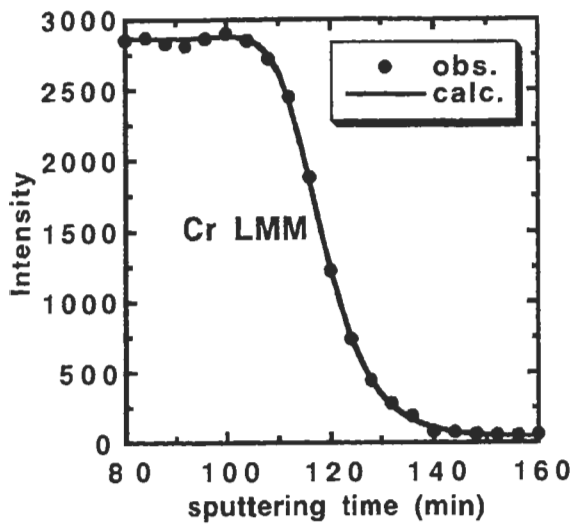


図4 Logistic function を用いた各種デプスプロファイルのフィッティング

#### 4 フィッティングパラメータと界面プロフィールの関係

Logistic function の 9 つのフィッティングパラメータのうち、 $D_0$  は界面幅、 $Q$  は界面プロフィールの非対称性を表し、この 2 つが界面の情報を示す。そして、 $4.39 \times D_0$  が 90%-10%、 $3.32 \times D_0$  が 84%-16% 界面幅 ( $2\sigma$ ) に相当し、図 3 に示したように 90%-10% 界面幅については、それに対応するスパッタリング時間が計算結果より得られる。ここでは、Ni/Cr 多層膜、GaAs/AlAs 多層膜、InP/GaInAsP 多層膜の各オージェデプスプロフィールをカーブフィッティングし、パラメータ  $Q$  および  $D_0$  を用いた解析について述べる。

Ni/Cr 多層膜は 1 0 の界面プロフィール、GaAs/AlAs 多層膜は 1 2 の界面プロフィール、そして InP/GaInAsP 多層膜は 1 2 の界面プロフィールを LOGIT によりカーブフィッティングを行い、決定したパラメータ  $Q$  と  $D_0$  の関係を図 5 に示す。図 5 が示すように  $Q$  と  $D_0$  は多層膜に依存した特有の関係を示すように見られる。Ni/Cr 多層膜については  $Q$  値がほぼ 0 (いわゆる対称形) であり、 $D_0$  のみが変わっている。それとは対照的に、GaAs/AlAs 多層膜は  $D_0$  の変化は小さく、 $Q$  が 0 ~ -1.5 の範囲を示している。そして、InP/GaInAsP 多層膜については  $Q$  と  $D_0$  の分布が全体に渡って見られる。一方、これまで報告されている実験結果より、深さ分解能を規定する主要因は、Ni/Cr 多層膜は表面あれ、GaAs/AlAs はアトミックミキシング、InP/GaInAsP 多層膜は表面あれおよび偏析と考えられる。したがって、パラメータ  $Q$  にはアトミックミキシング、 $D_0$  には表面あれの大きさが反映されると考えられる。

このように、深さ分解能を規定する主

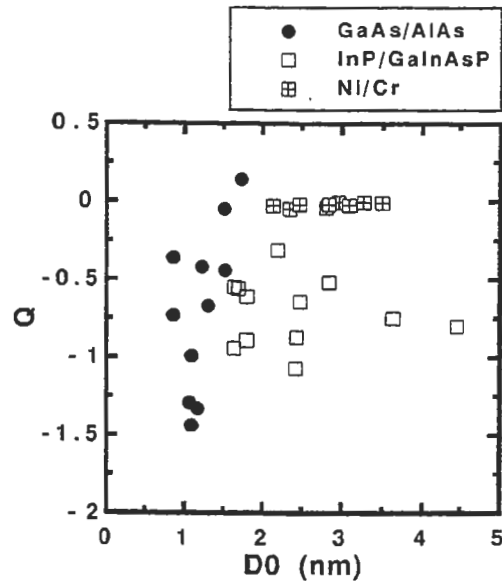


図 5 LOGIT のパラメータ  $Q$  と  $D_0$  の関係

要因とパラメータ  $Q$ 、 $D_0$  との関係を定性的に関連づけることができる。しかし、オージェ電子脱出深さの影響や拡散など考慮すべき項目があり、深さ分解能を規定する 1 つ 1 つの要因と  $Q$ 、 $D_0$  との関係を明らかにすることが今後の課題である。

#### 5 まとめ

LOGIT を用いたオージェデプスプロフィールデータの処理について概要を紹介した。

LOGIT は形状を問わず、界面プロフィールをフィッティングできる。

パラメータ  $Q$ 、 $D_0$  には界面プロフィールの情報が反映され、 $Q$  はアトミックミキシング、 $D_0$  は表面あれの大きさを表すと考えられる。

#### 文献

- 1) W.H.Kirchhoff, G.P.Chambers, J.Fine: J. Vac. Sci. Technol. A4, 1666(1986).
- 2) 山口昌哉: カオスとフラクタル, 1986, 講談社.
- 3) 荻原, 田沼: 分析化学第 45 年会講演要旨集, 226 (1996)