

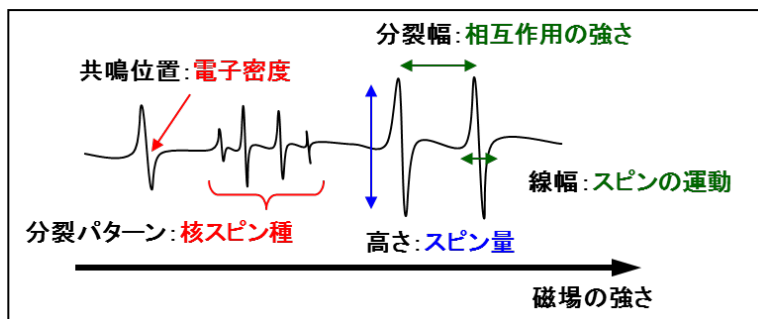
●電子スピン共鳴 (ESR) 法による材料評価

TN462

Materials Evaluation by ESR Method

[概要]

電子スピン共鳴 (ESR: Electron Spin Resonance) 法は電子スピン (不対電子) を観測する分光法であり、電子スピン共鳴は、磁場中に置かれた原子の不対電子が、特定の周波数のマイクロ波を吸収して、低準位から高準位へ遷移する現象を指します。



ESR 法は不対電子を持つ常磁性物質、ラジカル、欠陥 (ダングリングボンド*) 等を分

図1 ESR スペクトルから得られる情報

析対象としており、得られる ESR スペクトルから、不対電子の量、化学種の構造、電子状態に関する情報を得ることができます (表 1、図 1 参照)。* 結合手が一つ余っている不対電子の手をダングリングボンドと呼ぶ。

表 1 ESR 法による分析対象例

対象	種	目的
半導体	グラファイト Si, Ge, GaAs	不純物 (ドーパント) 欠陥の評価
金属イオン、金属錯体	Ti ³⁺ , Mn ²⁺ , Fe ³⁺ , Co ²⁺ , Cu ²⁺ , Gd ³⁺ 等	微量分析、配位状態
活性ラジカル	酸素ラジカル 活性酸素 過酸化ラジカル	触媒の表面状態 反応機構解明 抗酸化作用の評価

[事例 1]

2 種類のガラス材料を ESR 法で測定した結果、試料 B では試料 A で見られないピークが検出し、金属不純物の存在が確認されました (図 2 参照)。 g 値 (ピークの中心位置) は自由電子 ($g=2.003$) からずれており、 g 値の解析結果から試料 B のピークは、Ti (III) と推察され、その重量%濃度は 1.96 ppm と算出されました。

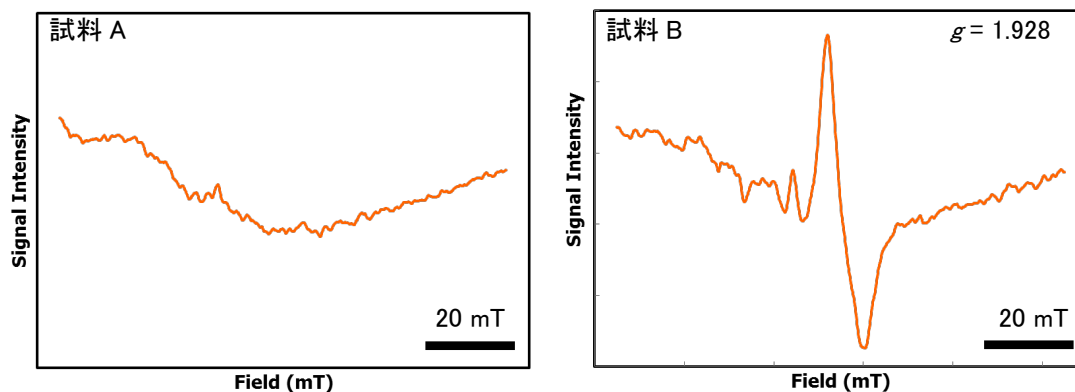


図 2 ガラス材料の ESR スペクトル

[事 例 2]

シリコンは液晶ディスプレイ用薄膜トランジスタ（TFT）、太陽電池など種々の半導体デバイスに利用されています。これらの半導体デバイスの性能や特性にはシリコン中の欠陥量、欠陥準位が大きな影響を及ぼすためその評価は重要です。このような構造欠陥はダングリングボンドとして考えられ、ESRによる評価が可能です。

シリコンのダングリングボンドは室温では観測できないため、低温での測定が必要です。図3にシリコンウエハのESRスペクトルを示します。室温測定（図3の赤線）ではほとんどピークが観測されないのに対して、低温（10 K）測定（図3の青線）では、 g 値よりシリコンの格子欠陥に帰属されるピークが観測できました。また、シリコンには不純物に由来すると推定されるピークが2本観測できました。ピークが2本に分裂していること、平均磁場での g 値（1.9987）、分裂幅（ $A = 4.2$ mT）、線幅（ $\Delta H_{pp} = 0.23$ mT）から、シリコンに含まれる不純物（ドーパント）はPと推定しました（表2参照）。

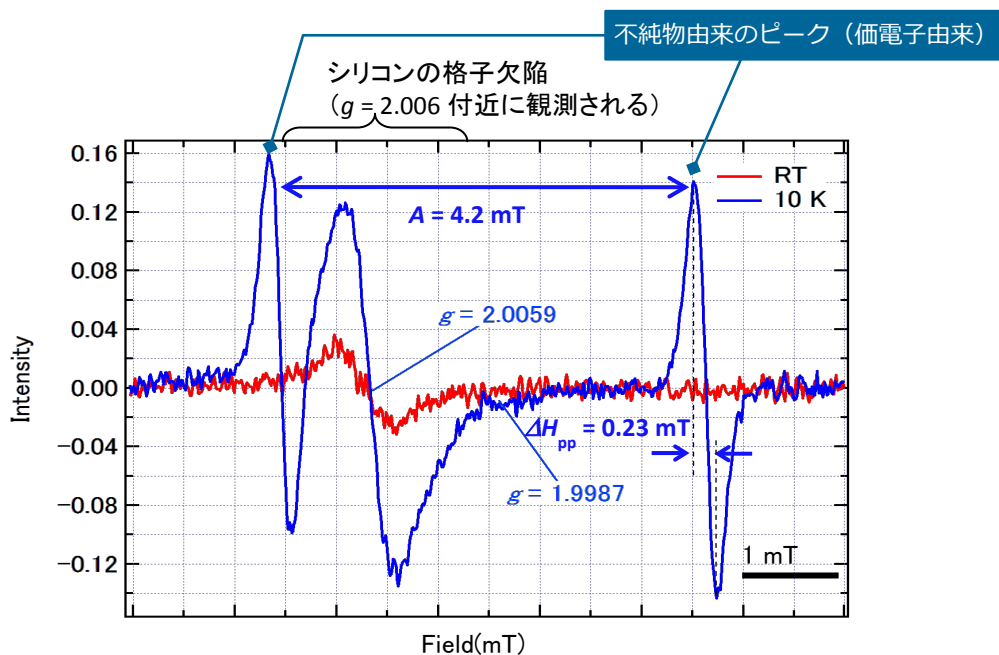


図3 シリコンウエハのESRスペクトル

表2 シリコン中の代表的なドナーのESRパラメータ¹⁾

核種	I	g	A / mT	$\Delta H_{1/2}$ / mT
⁷ Li	3/2	1.998	0.03	0.3
³¹ P	1/2	2.000	4.4	0.29
⁷⁵ As	3/2	2.0004	7.6	0.36
¹²¹ S	5/2	2.000	6.9	0.27
¹²³ S	7/2	2.000	3.8	0.27

1) W. Low, *Paramagnetic Resonance in Solids* (F. Seitz, D. Turnbull, eds.), p.178, Academic Press (1960)

[関連技術リンク]

電子スピン共鳴(ESR)法による高分子材料の評価

<https://www.scas.co.jp/technical-informations/technical-news/pdf/tn463.pdf>