

測定チャンバの排気速度が十分に大きければ、脱離したガスはチャンバ内に滞留しません。

このことは、ある時刻に発生した任意の脱離ガスの量と、その時刻の脱離ガスの分圧が比例することを意味しています。

その関係は時間 t の関数として次式で与えられます。

$$p_x(t) = \frac{A}{K \cdot S_x} n_x(t) \quad (1)$$

ここで p_x は脱離ガス分子 x の分圧 (Pa)、 A は試料面積 (m^2)、 K は気体定数、 S_x は脱離ガス分子 x に対する排気速度 (m^3/s)、 n_x は分子 x の単位時間あたりの脱離分子数 ($molecules/s \cdot m^2$) です。

脱離ガス分子の全脱離量 N_x は、 n_x を脱離開始 ($t=start$) から脱離終了 ($t=finish$) まで積分することにより求めることができます。

$$N_x = \int_{start}^{finish} n_x(t) dt = \frac{K \cdot S}{A} \int_{start}^{finish} p_x(t) dt \quad (2)$$

分子 x のフラグメント (質量数 M) の QMS イオン電流 I_{xM} は、分子 x の質量数 M のフラグメンテーションファクター (FF_{xM})、分子 x のイオン化難易度 (XF_x)、質量数 M の透過率 (TF_M)、イオンマルチプライヤーの印加電圧依存定数 (K_S) と分子 x の分圧の積です。

$$I_{xM} = p_x \cdot FF_{xM} \cdot XF_x \cdot TF_M \cdot K_S \quad (3)$$

TDS の面積強度はイオン電流値を積分したものですから、式 (3) から分子 x の質量数 M の面積強度 (PA_{xM}) は、

$$\begin{aligned} PA_{xM} &= \int_{start}^{finish} I_{xM}(t) dt \\ PA_{xM} &= FF_{xM} \cdot XF_x \cdot TF_M \cdot K_S \int_{start}^{finish} p_x(t) dt \end{aligned} \quad (4)$$

となります。さらに式 (2) を代入すると次式を導くことができます。

$$PA_{\text{XM}} = N_{\text{x}}(FF_{\text{XM}} \cdot XF_{\text{x}} \cdot TF_{\text{M}})K_S \frac{A}{K \cdot S_{\text{x}}} \quad (5)$$

この関係式が分子の脱離量と面積強度を関係づける基礎式となります。

この関係式を水素分子に適用すると次式になります。

$$PA_{H_2M_2} = N_{H_2}(FF_{H_2M_2} \cdot XF_{H_2} \cdot TF_{M_2})K_S \frac{A}{K \cdot S_{H_2}} \quad (6)$$

式(5)と式(6)の比をとると、

$$\frac{PA_{\text{XM}}}{PA_{H_2M_2}} = \frac{N_{\text{x}}(FF_{\text{XM}} \cdot XF_{\text{x}} \cdot TF_{\text{M}})K_S \cdot A / (K \cdot S_{\text{x}})}{N_{H_2}(FF_{H_2M_2} \cdot XF_{H_2} \cdot TF_{M_2})K_S \cdot A / (K \cdot S_{H_2})} \quad (7)$$

となり、さらに単位面積の試料として規格化すると、

$$\frac{PA_{\text{XM}}}{PA_{H_2M_2}} = \frac{N_{\text{x}}(FF_{\text{XM}} \cdot XF_{\text{x}} \cdot TF_{\text{M}})S_{H_2}}{N_{H_2}(FF_{H_2M_2} \cdot XF_{H_2} \cdot TF_{M_2})S_{\text{x}}} \quad (8)$$

と変形できます。 任意の分子の脱離量は式(8)を変形すると求めることができます。

$$N_{\text{x}} = PA_{\text{XM}} \left(\frac{N_{H_2}}{PA_{H_2M_2}} \right) \left(\frac{S_{\text{x}}}{S_{H_2}} \right) \left(\frac{FF_{H_2M_2} \cdot XF_{H_2} \cdot TF_{M_2}}{FF_{\text{XM}} \cdot XF_{\text{x}} \cdot TF_{\text{M}}} \right) \quad (9)$$

このうち $(N_{H_2}/PA_{H_2M_2})$ は、既知量の H^+ を注入した Si ウェハを試料として水素分子(H_2)を測定する実験で求めることができます。 他のパラメータ S_{x} , FF_{XM} , XF_{x} , TF_{M} はいくつかの分子に対して既知の値です。 したがって、これらのパラメータが既知の分子については EMD-WA1000 シリーズで定量することができます。