

1P070

2光子光電子分光法による水素終端シリコン基板の電子状態の解明
(慶大理工¹・阪大産研²・阪大基礎工³・JST-CREST⁴)

○中村 恒幸¹・宮島 謙¹・平田 直之¹・松本 剛士¹・森川 良忠²・冨田 博一³・中嶋 敦^{1,4}

【序】

固体表面の電子状態は古くから紫外光電子分光や電子線照射による逆光電子分光などにより研究されてきたが、近年、超短パルスレーザーを用いた2光子光電子分光法(2PPES)[1]により、試料表面を損傷させることなく、占有準位のみならず非占有準位をも同時に観測することが可能となった。本研究では、2光子光電子分光法により水素終端シリコン基板[H-Si(111)]の表面電子状態の解明を試みた。その結果、バルク由来の非占有準位とともに、新たな表面準位を観測した。この表面準位は角度分解、第一原理計算の結果から表面共鳴と帰属した。さらに電子励起過程で生じる鏡像準位の観測も成功し、水素終端シリコン基板の表面電子状態に関する新たな知見を得た。

【実験方法】

Si(111)基板(3×7×0.3 mm³, *n*型, ~0.05 Ωcm)をピラニア試薬(conc. H₂SO₄ : 30% H₂O₂ = 3 : 1)に浸漬させ、基板表面の有機物を除去するとともに、酸化膜を形成させた。次いで、基板を5%フッ化水素酸, 40%フッ化アンモニウム水溶液へ順次浸漬させエッチングを行ない、水素終端シリコン基板を得た。得られた基板は測定用μメタルチャンバー(到達真空度 1.2×10⁻¹⁰ Torr)に搬送し、XYZθマニピュレータに保持した。その後、試料にバイアス電圧(-1.00 V)を印加し、Ti:Sapphireレーザーの第三高調波(4.23~4.90 eV, 8 mW)の照射によって放出された光電子の運動エネルギーを半球型電子エネルギー分析器(Thermo VG Scientific Alpha 110)により測定して2PPEスペクトルを得た。

【結果および考察】

図1に水素終端シリコン基板の2PPEスペクトル(照射光:4.23~4.86 eV)を示した。顕著に観測されたピークA, B, Eに加え、ガウス関数によるデコンボリューションによりピークC, Dを見出した。各ピークの

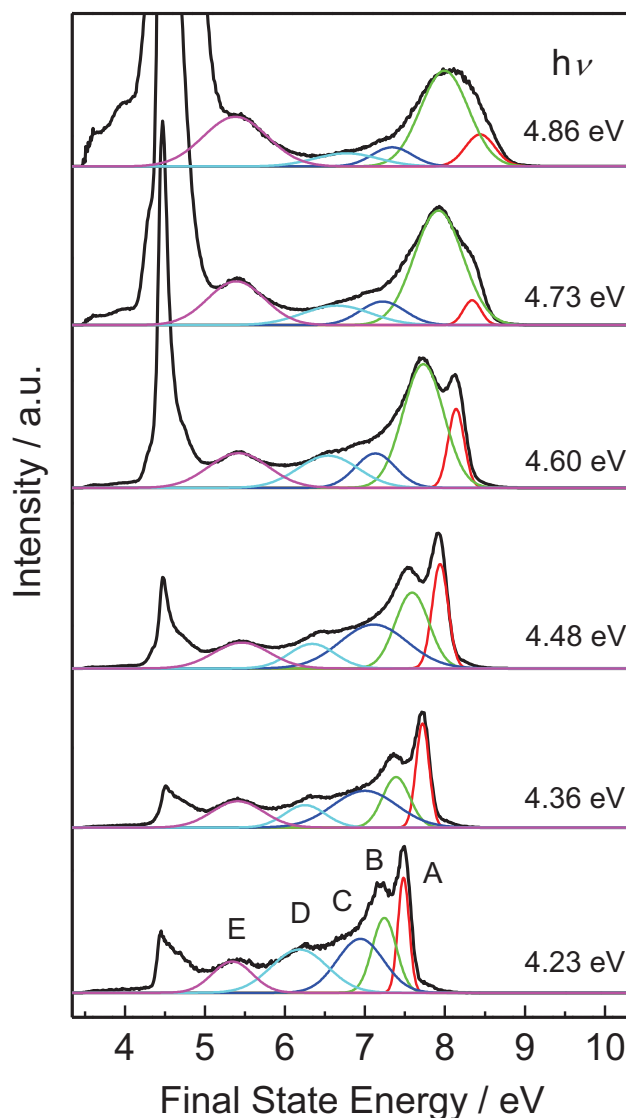


図1 H-Si(111)の2PPEスペクトル

由来を明らかにするために、照射光の光子エネルギーを変化させて2PPEスペクトルを測定し、図2にその光子エネルギー依存性をまとめた。ピークB, C, Dは光子エネルギーに対するピークシフト量がほぼ $1 \Delta h\nu$ であるため、非占有準位由来と帰属した。ピークEは光子エネルギー変化に対してシフトせず、エネルギープーリング過程[1]による光電子脱離であると考えられる。一方で、ピークAは光子エネルギーが4.6 eVより小さい領域では $2 \Delta h\nu$ のシフトを、4.6 eVより大きい領域では $1 \Delta h\nu$ のシフトをしている。また照射光の偏光依存性の結果からは、ピークAは表面準位由来、ピークB, C, D, Eはバルクバンド由来であると予測された。

ピークAの由来をより詳細に検討するために角度分解2PPE測定を行った。図3に角度分解2PPEスペクトル(照射光:4.23 eV)を示した。光電子出射角の増大に伴いピークAはわずかなシフトとともに消失した。この結果と第一原理計算の結果[2]から、ピークAは表面共鳴に由来すると帰属した。

一方、光子エネルギーが4.6 eV以上の場合は、光子エネルギー変化に対するシフト量、および角度分解の結果からピークAは非占有の表面準位と帰属した。過去に報告されたSi(100)の2PPE[3]からピークAは鏡像準位と考えられ、そのエネルギーはシリコンの誘電率を考慮した鏡像ポテンシャルから算出した理論値ともよく一致している。

以上のように、これまでの紫外光電子分光や逆光電子分光では観測されていない水素終端シリコン基板の表面電子状態に関する新たな知見を得ることに成功した。

【文献】

- [1] W. Steinmann, *Appl. Phys. A*, **49**, 365 (1989).
- [2] X. Blase, X. Zhu, and S. G. Louie, *Phys. Rev. B* **49**, 4973 (1994).
- [3] M. Kutschera, M. Weinelt, M. Rohlfing, and T. Fauster, *Appl. Phys. A* **88**, 519 (2007).

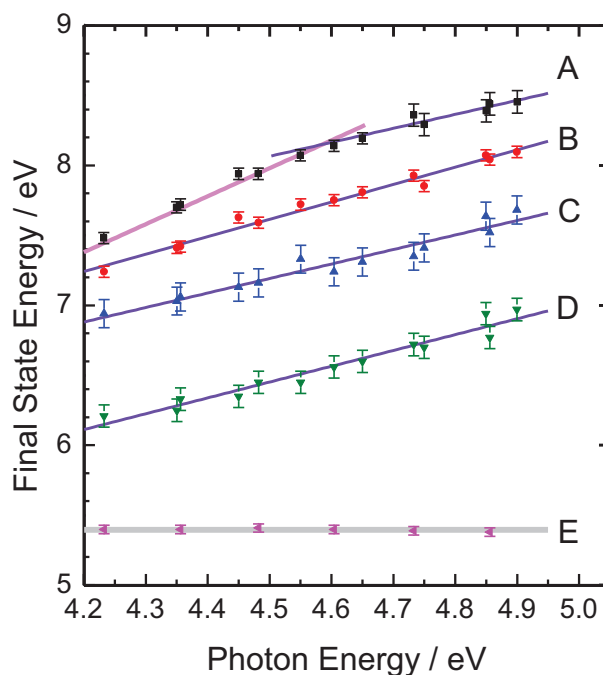


図2 H-Si(111)の2PPEピークの光子エネルギー依存性

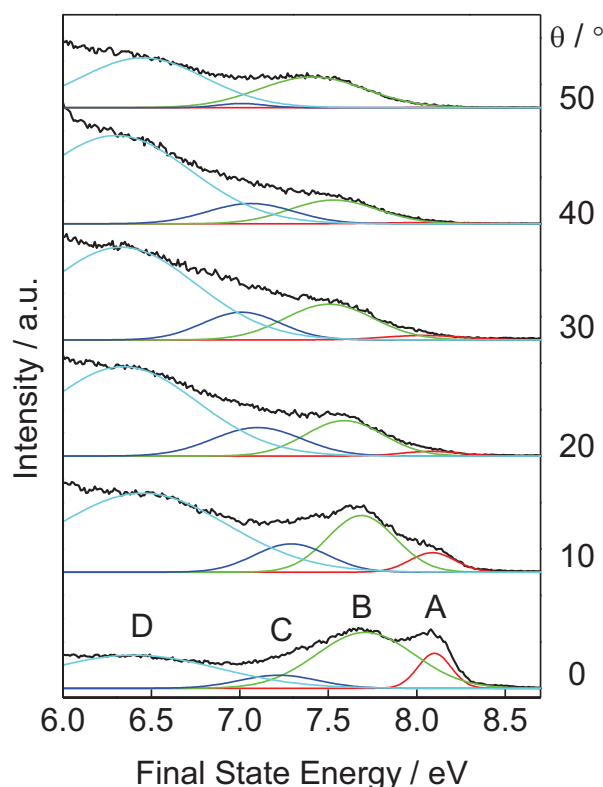


図3 H-Si(111)の角度分解2PPEスペクトル(照射光:4.23 eV)