

Si(110)-16×2 清浄表面の最安定構造モデル

(愛媛大学*, KEK-PF**)

○垣内拓大*, 久保田裕之*, 田原雅士*, 間瀬一彦**, 長岡伸一*

【序】 Si(110)-16×2 清浄表面は、エレクトロマイグレーションを用いることによって単一ドメイン構造を示し、これが他の面に比べ高い電荷移動度効率を示すことから新規デバイスの基板として注目が集まっている [1]。近年、Si(110)-16×2 清浄表面の最安定構造モデルがいくつか提唱され、最も有力視されているモデルとして N. D. Kim らが提唱した“adatom-tetramer-interstitial (ATI) モデル [2]”と、坂本らが提唱した“adatom-buckling (AB) モデル [3]”がある。そこで、本研究では、非常に表面敏感な光電子・オージェ電子コインシデンス分光法 (Photoelectron – Auger-electron coincidence spectroscopy : PEACS) を用いて Si(110)-16×2 清浄表面の表面原子配列モデルを検討した。

【実験】 Si(110)-16×2 の単一ドメインは、超高真空下で次のように作製した。(1) Si(110) ウエハーを $[1\bar{1}2]$ 方向に (横×縦=2×30 mm) に切り出し、アセトン、硝酸、純水の順に洗浄した。(2) Si(110)表面上の酸化物や汚染物質は、ウエハーを 1400 K 以上に加熱することで取り除いた。(3) 最後に、1523 K でフラッシングした後、1200 K で 2 秒間アニーリング、60 秒かけて 927 K まで温度を下げ 30 秒間のアニーリング、さらに 827 K で 10 分間のアニールを行うことで作製し、16 × 2 構造は、低速電子線回折 (LEED) で確認した。

光電子、オージェ電子スペクトル (PES、AES) および、Si $L_{23}VV$ オージェ電子をトリガーとして測定した Si 2*p* 光電子スペクトル (Si-2*p*-Si- $L_{23}VV$ PEACS) の測定は、Photon Factory のビームライン 12A に超高真空槽 (到達圧力: 2.3×10^{-8} Pa) を設置し、電子-電子-イオンコインシデンス (EEICO) 分光装置 [4] を設置して行った。EEICO 分光装置は、同軸対象鏡型電子エネルギー分析器 (ASMA) とダブルパス円筒鏡型電子エネルギー分析器 (DP-CMA) 等から構成されている。軟 X 線放射光 (SR) は、表面法線方向 84° より入射し、エネルギー ($h\nu$) は 130 eV に設定した。測定前後における Si(110)-16×2 清浄表面の汚染は、Si 2*p* 光電子スペクトルおよび LEED で確認し、無視できる程度であった。

【結果と考察】 図 1 は、Si(110)-16×2 清浄表面の Si $L_{23}VV$ AES である。図中の破線(a)-(d)は、Si-2*p*-Si- $L_{23}VV$ PEACS 測定のトリガーシグナルとした Si $L_{23}VV$ オージェ電子の運動エネルギー ($AeKE$) 位置である。図 2 は、同試料の(a) Si 2*p* 光電子スペクトル (実線+■) と(b) トリガーシグ

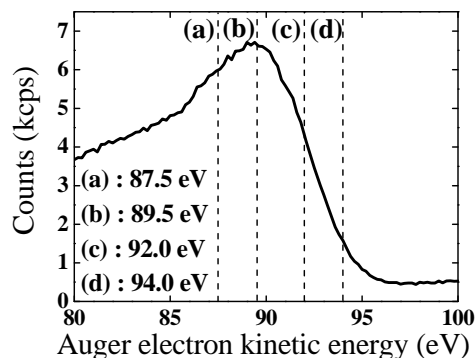


図 1. Si(110)-16×2 清浄表面の Si $L_{23}VV$ オージェ電子スペクトル。

ナルの $AeKE$ が 89.5 eV のときに得られた $Si-2p-Si-L_{23}VV$ PEACS (■) である。両スペクトルともに文献を参照し、Voigt 関数を用いて基板 (bulk) サイトと 5 つの表面サイト (SC1-5) に分離した [2, 3]。トリガーの $AeKE$ が 87.5、92.0 および、94.0 eV の結果についても同様のフィッティングを行った。それぞれのスペクトルについて、全ピーク面積に対する Bulk および SC1-5 成分の占有率を求めて、表 1 にまとめた。全ての $Si-2p-Si-L_{23}VV$ PEACS の成分分離の結果を $Si-2p$ PES のそれと比較すると、Bulk と SC3 サイトの占有率がいずれも減少していることが分かる。これは、SC3 サイトが第 1 層以下の Si サイトであることを示唆している。一方、SC1 と SC5 サイトの占有率は高くなっている。特に、SC5 サイトの占有率は、トリガーシグナルの $AeKE$ が大きくなるほど顕著に大きくなっていることが分かる。これは、SC1 と SC5 サイトが表面第 1 層のサイトであり、特に、SC5 はフェルミ準位直下に電荷密度を強く持つ表面サイトであることが示唆される。さらに、SC2 と SC4 の占有率を比較すると、一方が増加 (減少) すれば他方が減少 (増加) する関係にあることが分かる。この結果を満たすのは、SC1 が表面第 1 層の ad-atom、SC2 が unsaturated π band chain、SC3 が second layer、SC4 が saturated π band chain、SC5 表面第 1 層目でもっとフェルミ準位側に電荷密度分布を持っている tetramer となっている ATI モデルである [2]。AB モデルでは、本実験結果を満足し難い。よって、 $Si(110)-16 \times 2$ 清浄表面の最安定構造モデルは、ATI モデルが最適であると考えられる。

表 1. $Si-2p-Si-L_{23}VV$ PEACS 及び $Si-2p$ PES のカーブフィッティング結果による各ピーク面積占有率。括弧内の矢印は、 $Si-2p$ PES の各ピークの面積占有率と $Si-2p-Si-L_{23}VV$ PEACS のそれを比較した時の増減を示している。

Kinetic energy of Si						
$L_{23}VV$ Auger electron taken as trigger signal	Bulk (%)	SC1 (%)	SC2 (%)	SC3 (%)	SC4 (%)	SC5 (%)
87.5 eV	17 (↓)	10 (↑)	18 (—)	19 (↓)	23 (↑)	13 (↑)
89.5 eV	11 (↓)	10 (↑)	26 (↑)	22 (↓)	13 (↓)	18 (↑)
92.0 eV	21 (↓)	8 (↑)	20 (↑)	16 (↓)	13 (↓)	22 (↑)
94.0 eV	10 (↓)	8 (↑)	16 (↓)	21 (↓)	19 (↑)	26 (↑)
$Si-2p$ PES (Singles)	31	5	18	25	15	6

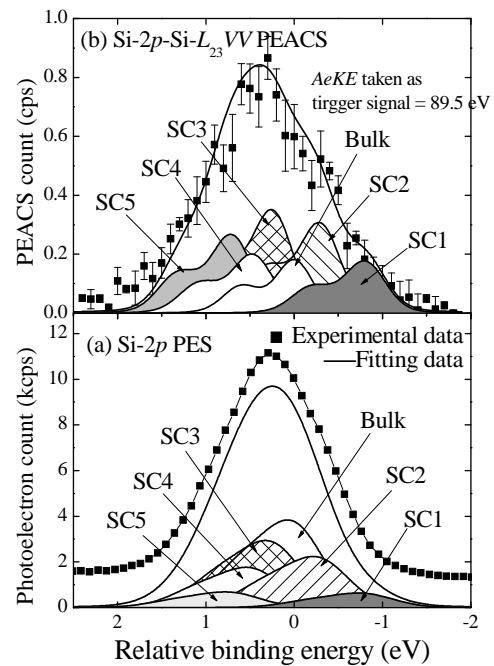


図 2. (a) $Si(110)-16 \times 2$ 清浄表面の $Si-2p$ 光電子スペクトル。(b) 同試料の $Si-2p-Si-L_{23}VV$ PEACS (トリガーとしたオーグ電子の運動エネルギー = 89.5 eV)。

【参考文献】 [1] Y. Yamada *et al.*, 表面科学 **29**, 401 (2008), [2] N. D. Kim *et al.*, Phys. Rev. B **75**, 125209 (2007)., [3] K. Sakamoto *et al.*, Phys. Rev. B **79**, 045304 (2007)., [4] T. Kakiuchi *et al.* J. Vac. Soc. Jpn. **51**, 749 (2008).