

光電子・オージェ電子コインシデンス分光法による  
Si(110)-16×2 清浄表面の原子構造と局所価電子状態

(<sup>1</sup>愛媛大学理学部、<sup>2</sup>KEK-PF、<sup>3</sup>総研大)

○垣内拓大<sup>1</sup>、吉崎佑也<sup>1</sup>、久保田裕之<sup>1</sup>、佐藤勇輝<sup>1</sup>、間瀬一彦<sup>2, 3</sup>)

Atomic Structure and Local Valence Electronic States of Clean Si(110)-16×2 Surface  
Studied by Using Photoelectron Auger-Electron Coincidence Spectroscopy

(<sup>1</sup>Ehime Univ., <sup>2</sup>KEK-PF, <sup>3</sup>Grad. Univ. Adv. Stud.)

T. Kakiuchi<sup>1</sup>, Y. Yoshizaki<sup>1</sup>, H. Kubota<sup>1</sup>, Y. Sato<sup>1</sup>, K. Mase<sup>2, 3</sup>

**【序】** Si(110)-16×2 単一ドメイン (SD) 表面は、Si(100)や Si(111)表面に比べ高いホール移動度を示すことから新規デバイス基板として注目されている。近年、Si(110)-16×2-SD の最安定構造モデルがいくつか提唱されているが[1-2]、その中でも坂本らが提唱した Adatom-Buckling (AB) モデルが有力視されている[1]。坂本らは Si(110)-16×2SD 清浄表面の 5 つの Si-2*p* 光電子ピークの表面成分を SC1 : the buckled upper atoms、SC2 : the unbuckled atoms with dangling bond (DBs) and the second layer atoms with DBs、SC3 : the first and second layer atoms without DBs、SC4 : the adatoms、SC5 : the buckled lower atoms に帰属し、バルクのバンドギャップ中の表面状態  $S_1$  ( $E_B = 0.2$  eV) は the adatoms (SC4) の DBs に、 $S_2$  ( $E_B = 0.4$  eV) は the buckled upper atoms (SC1) の DBs に、 $S_3$  ( $E_B = 0.75$  eV) は the lower buckled Si atoms (SC5) と the first layer unbuckled Si atoms (SC2) の DB に、 $S_4$  ( $E_B = 1.0$  eV) は the second layer atoms (SC2) の DBs にそれぞれ局在していると結論した。本研究では、オージェ電子 (光電子) - 光電子 (オージェ電子) コインシデンス分光法 [APECS (PEACS)] を用いて、表面サイト (SC1-SC5) と表面状態 ( $S_1$ - $S_4$ ) の相関を観測し、AB モデルの妥当性を検討したので報告する。

**【実験】** Si(110)-16×2-SD 清浄表面は、 $1.3 \times 10^{-8}$  Pa の超高真空中で  $[1\bar{1}2]$  方向に電流を流して 1523 K でフラッシング、1200 K で 3 秒間、927 K で 30 秒間、827 K で 10 分間のアニールを行うことで作製した。Si(110)-16×2 の Si-2*p* 光電子スペクトル (PES)、Si- $L_{23}$  VV オージェ電子スペクトル (AES) および、コインシデンススペクトルは、Photon Factory の BL-11D にて、放射光のエネルギー ( $h\nu$ ) を 130 eV に設定し、電子-電子-イオンコインシデンス分光装置[3]を用いて測定した。測定前後における試料表面の構造変化や汚染は、無視できる程度であった。

**【考察】** Si(110)-16×2SD 清浄表面の Si-2*p* 光電子の SC4 成分をトリガーシグナルとして測定した Si- $L_{23}$  VV-Si-2*p* APECS (黒丸) と通常の Si- $L_{23}$  VV AES (実線) を図 1 に示す。ここで

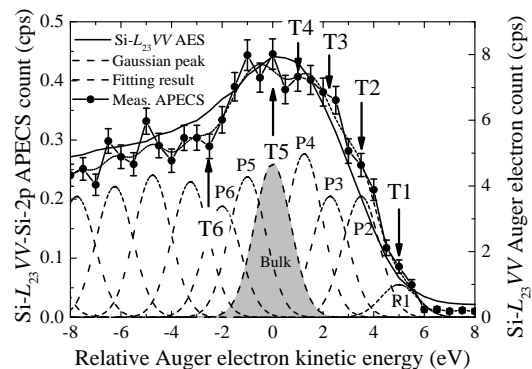


図 1. Si(110)-16×2-SD の Si-2*p* 光電子の SC4 成分をトリガーシグナルとして測定した Si- $L_{23}$  VV-Si-2*p* APECS スペクトル。

AEPCS シグナルと AES シグナルの脱出深さ ( $ED_{\text{AEPCS}}$ ,  $ED_{\text{AES}}$ ) はそれぞれ  $1.5 \text{ \AA}$ 、 $5.1 \text{ \AA}$  である。SC4 の  $\text{Si-}L_{23}VV\text{-Si-}2p$  APECS は  $\text{Si-}L_{23}VV$  AES と比較して、高運動エネルギー ( $KE$ ) 側で強度が強くなった。一般に、特定内殻準位 ( $C$ ) に表面状態 ( $V_s$ ) が局在する場合、表面サイト特有の  $CV_sV_s$  オージェ過程が起きる。したがってこの高  $KE$  側の成分は、SC4 ピークに対応する表面サイトに局在する表面状態が関与した  $CV_sV_s$  オージェ過程に由来すると考えられる。次に、図1の T1 の位置に対応するオージェ電子をトリガーシグナルとして  $\text{Si } 2p$  光電子- $\text{Si-}L_{23}VV$  オージェ電子コインシデンススペクトル ( $\text{Si-}2p\text{-Si-}L_{23}VV\text{PEACS}$ ) を測定した (図2、黒丸)。このスペクトルを文献[1-2]を参照し、Voigt 関数を用いて5つの表面成分 SC1-SC5 とバルク成分に成分分離した (図2、実線)。SC1-SC5 の表面ケミカルシフトは文献値に固定し、ガウス幅は  $0.36 \text{ eV}$ 、ローレンツ幅は  $0.08 \text{ eV}$ 、およびスピン-オービットカップリングは  $0.6 \text{ eV}$  とした。通常の  $\text{Si-}2p$  PES (破線) と比較して、バルク成分の強度が大きく減少しているのは PEACS シグナルの脱出深さ ( $ED_{\text{PEACS}}$ ) が光電子シグナルの脱出深さ ( $ED_{\text{PES}}$ ) より小さいためである。同様に図1中の T2~T6 の位置の  $\text{Si-}L_{23}VV$  オージェ電子をトリガーシグナルとして測定した  $\text{Si-}2p\text{-Si-}L_{23}VV$  PEACS を成分分離し、SC1-SC5 の光電子ピーク面積比のトリガー電子の運動エネルギーに対してプロットしたグラフを図3に示す。

SC1 および SC2 成分の面積は、T3 のトリガーシグナル付近でピークを形成するのに対し、SC3、SC4、および SC5 の成分は、T1 のトリガーシグナル付近で最も強くなった。AB モデルの場合、 $CV_sV_s$  オージェ電子のうち、もっとも運動エネルギー ( $AeKE$ ) が大きくなると期待されるのは、内殻準位が深く、表面準位が浅い adatom (SC4) サイトである。adatom (SC4) サイトの次にもっとも高運動エネルギー側にオージェピークを持つと期待される表面サイトは、SC3 ( $AeKE^{\text{adatom}} - AeKE^{\text{SC3}} = -0.62 \text{ eV}$ )、SC5 ( $AeKE^{\text{adatom}} - AeKE^{\text{SC5}} = -0.76 \text{ eV}$ ) である。以上のように AB モデルが本実験結果を良く説明できることがわかった。その他のモデルでは、我々の結果を十分説明できなかつたことから AB モデルが最も妥当であると結論した。

【参考文献】 [1] K. Sakamoto *et al.*, Phys. Rev. **79**, 045304 (2009)., [2] N. D. Kim *et al.*, Phys. Rev. B **75**, 125309 (2007)., [3] T. Kakiuchi *et al.*, J Vac. Soc. Jpn. **51**, 749 (2008).

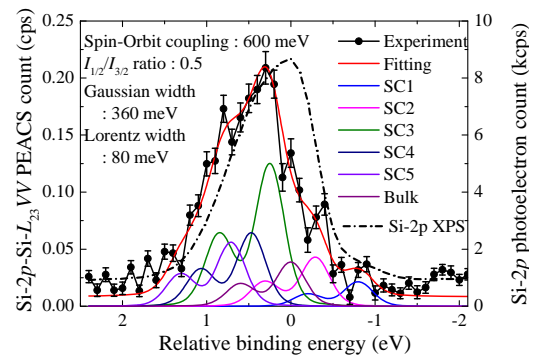


図2. 図1中の T1 のオージェ電子をトリガーシグナルとして測定した  $\text{Si}(110)\text{-}16 \times 2\text{-SD}$  清浄表面の  $\text{Si-}2p\text{-Si-}L_{23}VV\text{PEACS}$  スペクトル。

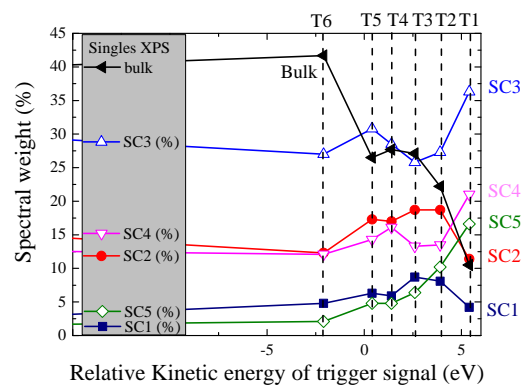


図3. 図1中の T2~T6 の位置の  $\text{Si-}L_{23}VV$  オージェ電子をトリガーシグナルとして測定した  $\text{Si-}2p\text{-Si-}L_{23}VV\text{PEACS}$  を成分分離し、SC1-SC5 の光電子ピーク面積比のトリガー電子の運動エネルギーに対してプロットしたグラフ。