## Si(110)-16×2 清浄表面への H<sub>2</sub>O 解離吸着:表面物性と表面1次元構造の変化

(愛媛大理<sup>1</sup>, KEK-PF<sup>2</sup>, 総研大<sup>3</sup>) ○垣内拓大<sup>1</sup>, 西浦伸吾<sup>1</sup>, 川本淳滋<sup>1</sup>, 長岡伸一<sup>1</sup>, 間瀬一彦<sup>2,3</sup>

## Dissociative adsorption of H<sub>2</sub>O on clean Si(110)-16×2 surface:

change of surface property and one-dimensional structure

(Ehime Univ.<sup>1</sup>, KEK-PF<sup>2</sup>, Grad. Univ. Adv. Stud.<sup>3</sup>) oT. Kakiuchi<sup>1</sup>, S. Nishiura<sup>1</sup>, J. Kawamoto<sup>1</sup>, S. Nagaoka<sup>1</sup>, K. Mase<sup>2, 3</sup>

【序】 Si(110)-16×2 清浄表面は単一ドメイン (SD) 構造を示し、近年、その最安定構造 モデルとして Adatom-Buckling (AB) モデルが提唱された (図1) [1]。この表面は、他の(100) 面等と比較してホール移動度が2倍程度高いため、次世代 Si 半導体基板として注目されてい る。しかし、Si(110)-16×2 の表面活性が高いため大気中では SD 構造を保持することができ ない。そこで、不活性処理によって SD 構造を保持してその上に薄膜を作製できれば、原子 スケールでの半導体加工の可能性を大きくする。本研究では、Si(110)-16×2 に H<sub>2</sub>O を曝露し た後の SD 構造の変化、表面活性評価、および局所価電子状態の変化の解明を行った。

【実験】 Si(110)-16×2-SD 清浄表面は、~3×10<sup>-8</sup> Pa の超高真空中で [112]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 清浄表面への H<sub>2</sub>O の導入量は、0.1 Lamgmuir (1 L, 1 L = 1.3×10<sup>-4</sup> Pa·sec)、0.5 L、1.0 L、および 5.0 L とした。試料の表面構造は、低

速電子回折(LEED)像によって評価した。 Photon FactoryのBL-11Dにて、Si-2p光電 子スペクトル(PES)を測定することによっ て表面化学状態を評価し、特定表面サイトか ら放出されたSi-2p光電子と同時に計測した Si- $L_{23}VV$ オージェ電子スペクトル (Si- $L_{23}VV$ Si-2pコインシデンススペクトル) を測定することによって局所価電子状態を評 価した。3~5時間毎に試料表面を清浄化し、 測定前後における試料表の構造変化や汚染が ないことを確認した。

【結果と考察】 図1下は、0.5 Lの水を曝 露したSi(110)-16×2表面のSi-2pPESである。 Voigt 関数を用いた成分分離の結果、 Si(110)-16×2 清浄表面に現れる5つの表面サ イトSC1-5 (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) と、H<sub>2</sub>Oの 解離吸着に由来したSi-OH、Si-H、帰属が不 明なA、およびB site が現れた[2]。Si バルク のSi-2p 内殻準位を基準とした各表面サイト



図1.0.5 L の水を曝露した後の Si(110)-16×2 から得られた Si-2p 光電子ス ペクトルと AB モデルの概念図。

のシフト量は、SC1:-0.80 eV、SC2:-0.29 eV、 SC3: +0.25 eV, SC4: +0.47 eV, SC5: +0.71 eV, Si-H: +0.31 eV, Si-OH: +0.80 eV, A-site: -0.56 eV、B-site: -0.23 eV とした[1, 2]。図 2は、水を 0.1 L、1.0 L、5.0 L 曝露して得 られた Si(110)-16×2 表面の Si-2p PES につ いても、同様の Voigt 関数を用いた成分分離 を行って、各ピーク面積比の変化を水の導入 量に対してプロットした図である。水を 1.0 L以上導入しても各ピーク強度に変化が現れ ないことは、1.0 L 以下で飽和吸着すること を示している。特に、SC1 と SC2 のピーク は、0.1 L の水の導入によってピーク強度が ほぼ0まで減少した。SC3 サイトも水を0.5L 導入することによって大きく減少し、これ以 上の水を導入してもピーク面積に変化はほと んど生じなかった。AB モデルにおける SC1、 SC2、および SC3 の一部は、表面 1 次元構造 上のステップに位置していることから、水は ステップ近傍で解離吸着することが分かった。 一方で、SC4 および SC5 の強度は大きく変化 しなかった。これは、水が最表面の1次元の テラス状に位置する SC4 および SC5 サイト部 分では解離吸着し難いことを示している。ま た、LEED像の観測によると、5.0Lの水を曝 露しても Si(110)-16×2 面のスポットは若干ぼ やけるだけで、SD構造も残っていた。これは、 最表面の1次元構造を形成する SC4 サイトに 水が吸着し難いためだと考えられる。

図3は、Si(110)-16×2 清浄表面および水を5. 0 L 導入した Si(110)-16×2 面の表面サイトを 選別して測定した Si-*L*<sub>23</sub>*VV*-Si-2*p* APECS で ある。図3 (a) に示すように、Si(110)-16×2 清浄表面の *ReBE* = +0.80 eV の Si-2*p* 光電子



**図2.**各 Si-2*p* 光電子ピーク面積 vs H<sub>2</sub>O の導入量。



図3. Si(110)-16×2 清浄表面と 5.0 L の水を 吸着させた Si(110)-16×2 表面の Si-L<sub>23</sub> VV-Si-2p APECS。

(SC3, SC4, SC5 成分) と同時に計測した Si- $L_{23}$  VV-Si-2p APECS は、ReBE = -0.56 eV の Si-2p 光電子 (SC1, SC2 成分) と同時に計測したそれよりも高運動エネルギー領域までスペ クトル構造を持つことが分かる。これは、SC3、SC4、および SC5 サイト近傍に低結合エネ ルギーの表面準位が局在していることを示している。しかし、図 3 (b)に示すように水を吸着 させると ReBE = +0.80 eV の Si-2p 光電子をトリガーとして測定した Si- $L_{23}$  VV-Si-2pAPECS の高運動エネルギー側のスペクトル強度は消失することがわかる。これは、水の吸着 によって SC3、SC4、SC5 近傍に局在していた表面準位が消失していることを示している。 一方で、図 3 (c)に示すように ReBE = -0.56 eV の Si-2p 光電子をトリガーとして測定した Si- $L_{23}$  VV-Si-2p APECS は、水を吸着させることによってメインピーク近傍での変化が見ら れる。これは、SC1 および SC2 サイトが消失することで最も価電子密度の高い準位の電子密 度が変化することを示している。

本研究によって、Si(110)-16×2 清浄表面への水の吸着過程と物性変化を明らかにすることができた。

【参考文献】 [1] K. Sakamoto *et al.*, Phys. Rev. B **79**, 045304 (2009)., [2] J.-J. Gallet *et al.*, J. Phys. Chem. C **115**, 7686 (2011).