

## 新博士紹介

1. 氏名 坂本一之 (現: 東北大学理学部物理学科)
2. 論文提出大学 大阪大学大学院基礎工学研究科
3. 学位の種類 博士 (理学)
4. 取得年月 1994年3月
5. 題目 Ion-Desorption and Photoemission Studies of NO, O<sub>2</sub> and K Adsorbed Si(111) Surfaces

### 6. アブストラクト

Si(111) 清浄表面はよく知られているように7×7構造をとる。O<sub>2</sub>/Si(111) 表面を調べるのはSiの酸化の初期過程を知るうえで大切であり、その解釈もSTMの実験<sup>1), 2)</sup> ではon-topに酸素が吸着しているか否かで2つの説に別れていることから興味を持たれる。NOは排気ガスの主成分であることより工業的観点から関心が持たれており、また(2π)\*軌道に電子を1個持つことによって物理的にも大変興味を持たれる。Si(111) 表面上での吸着状態とイオンの脱離過程をO<sub>2</sub>/Si(111) 表面ではESD (電子刺激脱離) で、NO/Si(111) 表面に関してはESDとPSD (光刺激脱離) の2つの手法を用いて研究した。また、ARUPS (角度分解光電子分光) でSi(111) 3×1-K表面の電子状態について調べた。ここでは放射光を用いて行ったNO/Si(111) 表面のPSDとSi(111)3×1-K表面の研究について簡単に述べたいと思う。

#### (1) NO/Si(111) 表面

NOはSi(111) 表面上に低温ではbridgeとon-topの2つのサイトに分子状で吸着し、高温(室温)では解離吸着することがEELSの結果<sup>3)</sup> から分かっている。ESDの実験は室温と190Kの2つの温度で行った。室温では過去の報告<sup>4)</sup> と同様に脱離イオン種としO<sup>+</sup> (とH<sup>+</sup>) が観測され、190Kにおいてはそれ以外にN<sup>+</sup>がESDの実験として初めて観測された。190KのN<sup>+</sup>には2種類の異なる運動エネルギーを持つものがあることが分かり、これらのESDIAD (脱離イオンの放出角度分布) の

パターンからbridgeとon-topの2サイトからのものであることが分かった。

NO/Si(111) 表面のPSDの実験は高エネルギー研究所PF BL-7Bでsample温度90Kで行った。PSDによるイオン脱離はESDと同様の過程で起こると考えられている。0次光を用いたTOF (飛行時間) の実験では、脱離イオン種としてESDで観測されたもの以外にNO<sup>+</sup>, O<sub>2</sub><sup>+</sup>, N<sub>2</sub>O<sup>2+</sup>が観測された。これらのものはPSDの実験で、イオンとしては初めて観測された (O<sub>2</sub><sup>+</sup>は中性粒子としても観測はされていない)。新しく観測された3つのイオン (NO<sup>+</sup>, O<sub>2</sub><sup>+</sup>, N<sub>2</sub>O<sup>2+</sup>) は190KにおけるESDで観測されなかったことから90KでSi(111) 表面上に物理吸着し、110Kで昇温脱離してしまうN<sub>2</sub>Oからのものであると考えた。N<sup>+</sup>に関してはESDと同様に2つの異なる運動エネルギーをもつものが観測された。PSDにおける運動エネルギーがESDのものと同しいことから、N<sup>+</sup>の起源は同じであると考えた。光の波長を変えるとN<sup>+</sup>のしきい値がNOの3σ分子軌道に当たる19eVであることが分かった (Fig.1)。3σ分子軌道は主にOの2p軌道からなっていることを考えると、Oを励起してN<sup>+</sup>が脱離するわけであるからNOは表面上にSi-O-Nの形で吸着していると考えた。

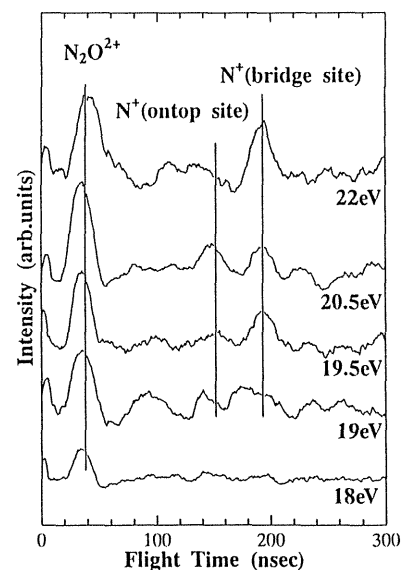


Fig.1  $h\nu = 20\text{eV}$  付近での TOF スペクトル。

## (2) Si(111)3×1-K表面

Si(111) 7×7清浄表面にKなどのアルカリ金属を吸着させると、室温では $\delta$ 7×7構造を、500°Cでは3×1構造をとることが知られている。Si(111)3×1-K表面の研究はこれまでSTM<sup>5)</sup>、LEED<sup>6)</sup>やRHEED<sup>7)</sup>などで行われている。LEED<sup>6)</sup>のI-V曲線からは、これらの3×1表面はSiが再配列して構成されていると考えられている。STM<sup>5)</sup>の実験では観測された電子の占有状態がアルカリ金属のものであるとして飽和被覆度は2/3MLであると考えられている。また、この表面の構造モデルはSTMなどの結果から飽和被覆度が2/3MLであるものがいくつか提案されている。

我々は、Si(111) 3×1-KのARUPS (角度分解光電子分光) の実験を高エネルギー研究所PF BL-18Aで行った。Si(111) 3×1-K表面の電子状態を測定し、価電子帯のエネルギー分散を求め、6つの表面準位 (surface state) を確認した。Fig.2にブリルアンゾーンの境界における表面準位の分散を示す。これらの表面準位のうち、 $S_i$ がPandey<sup>8)</sup>によって提唱された $\pi$ -bonded chainのものと分散の幅 (0.5eV) や傾向 ( $E_s$ が $\bar{\Gamma}$ で最大、 $\bar{F}$ で最小) が似ていることから、この表面では $\pi$ -bonded chainが形成されていると考えた。また、XPSによるSi LVV AugerとK 2pの強度を飽和被覆度が1MLであると思われているSi(111)  $\delta$ 7×7-Kと比較することによって、この表面の被覆度がこれまで提唱されていた2/3MLではなく、1/3MLであることが分かった。これらの結果より、単位格子内に1個のK原子を含み、 $\pi$ -bonded chainを含むSi(111) 3×1-K表面の新しい構造モデル (Fig.3) を考えた。STMでアルカリ金属ではなく、Siのdangling bondによる $\pi$ -bonded chainを観測していたと考えれば、このモデルでSTM像のzig-zag chainも説明できる。

## 文献

- 1) Ph. Avouris et al.: J. Vac. Sci. Technol. **B9**, 424(1991).
- 2) J.P. Pelz et al.: Phys. Rev. **B42**, 3761(1990).
- 3) Z. Ying et al.: J. Vac. Sci. Technol. **A7(3)**, 2099(1989).
- 4) M. Nishijima et al.: J. Appl. Phys. **46**, 3089(1975).
- 5) T. Hashizume et al.: Surf. Sci. **246**, 189(1991).
- 6) W.C. Fan et al.: Phys. Rev. **B40**, 5479 (1989).

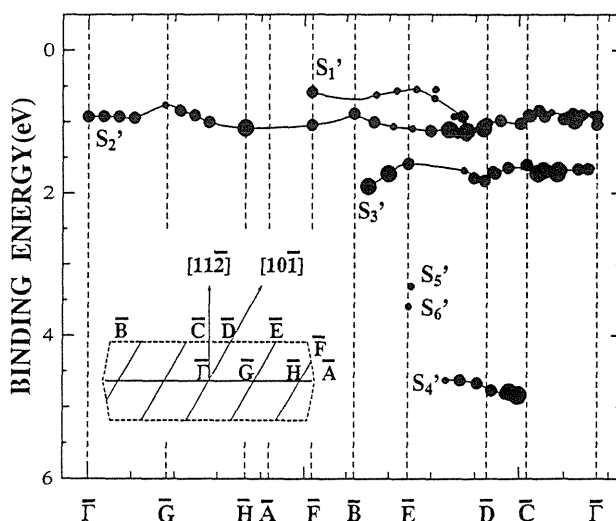


Fig.2 3×1ブリルアンゾーンの境界での表面準位の分散。挿入図は3×1ブリルアンゾーンを示す。

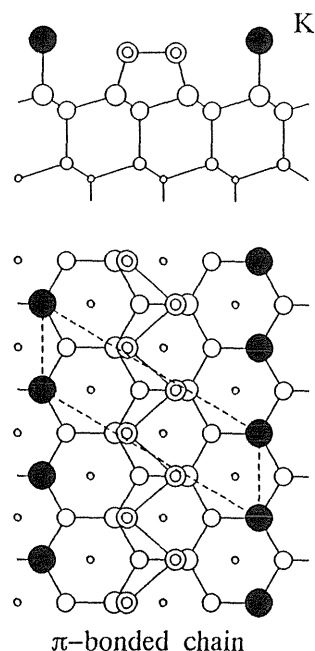


Fig.3 Si(111) 3×1-K表面の構造モデル。

(受付番号 94015)