

Title	Theoretical Analysis of the Atomic Arrangement of Solid Sur-faces by the High Energy Ion Scattering
Author(s)	柳澤, 淳一
Citation	
Issue Date	
Text Version	none
URL	<a href="http://hdl.handle.net/11094/37308">http://hdl.handle.net/11094/37308</a>
DOI	
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/repo/ouka/all/>

氏名・(本籍)	やなぎ 柳	さわ 澤	じゆん 淳	いち 一
学位の種類	工	学	博	士
学位記番号	第	9776	号	
学位授与の日付	平成3年3月26日			
学位授与の要件	基礎工学研究科 物理系専攻 学位規則第5条第1項該当			
学位論文題目	Theoretical Analysis of the Atomic Arrangement of Solid Surfaces by the High Energy Ion Scattering (高エネルギーイオン散乱による固体表面原子配列の理論的解析)			
論文審査委員	(主査) 教授 吉森 昭夫 (副査) 教授 天谷 喜一 教授 遠藤 将一			

### 論文内容の要旨

高エネルギーイオン散乱 (HEIS) を用いた固体表面の原子配列の解析では、シミュレーションによる入射イオンの散乱強度の計算値と実験値との比較が不可欠である。従来行われてきた極めて簡単な表面原子配列を仮定したモデルによる解析では、複雑な再構成をおこなっている表面の原子配列を決めるには限界があると考えられる。また逆に他の実験、理論から提案されたモデルでHEISの実験結果が説明できるか否かについて検討することは、そのモデルの妥当性の検証として重要である。

本研究では従来用いられてきたシミュレーションプログラムを高速化することにより、より複雑なモデルに対する計算を可能にした。例としてSi (111)  $7 \times 7$  表面のモデルとして広く受け入れられているDASモデルについて、入射イオンの散乱強度の入射エネルギー及び入射角依存性を計算した。DASモデルの表面数層の原子に、それぞれの理想バルク位置からの静的変位を考慮することによって実験結果を良く説明できることを示した。このモデルは必ずしも従来得られている理想表面を用いた解析から予測された結果とは一致せず、実際にこのようなモデルについて計算して初めて実験結果との一致が明らかになったものである。

別の応用例としてW (001) 表面のHEISの実験結果に関する長年の問題の再解釈を試みた。清浄表面と水素飽和吸着表面とから得られる散乱強度の差が高エネルギー側ではほぼ一定値になることから、従来は清浄表面では約半分の表面原子が大きな面内方向の静的変位を持つという。他の実験事実と合わない解釈がなされてきた。本研究では、清浄表面について全ての表面原子がある分布（ここでは2次元ガウス分布を仮定）に従ってランダムな大きさの静的変化を持つというモデルを仮定し、表面原子の熱振動の振幅の増大の効果を考慮することによって、このモデルでも実験結果が説明できることを示した。

結論として本研究で高エネルギーイオン散乱のシミュレーションの高速化により複雑な表面原子配列模型に対しても解析が可能であることを示し、代表的な再構成半導体表面と再構成金属表面に対して現在信頼されている模型の妥当性を実証することができた。

### 論文審査の結果の要旨

固体表面の局所的な原子配置を知る有力な手段として、高エネルギーイオン散乱法がある。メガ電子ボルト領域の高エネルギーを持つイオンを、結晶表面に対し適当な原子列方向（チャネリング方向）に入射し、結晶バルク原子による散乱を少なくして、表面原子による散乱を精度よく求める実験手段である。この解析には計算機実験が用いられるが、従来のものはかなり計算時間がかかり、複雑な再構成表面についての実験結果の解析はほとんど行われていなかった。申請者はこのプログラムをベクトル化することによって、高速化し、複雑な再構成表面についても解析が行えるようにした。シリコン（111） $7 \times 7$ 再構成表面とタングステン（100） $c(2 \times 2)$ 再構成表面については、信頼できる再構成構造模型が提案されていながら、高エネルギーイオン散乱の実験結果の解析は放置されていた。前者については、現在この再構成表面の構造模型として確実と思われる、D A S (dimer-adatom-stacking-fault) 構造がある。この構造の原子の詳細な位置については三つの提案がなされているが、この三つについて、初めて高エネルギーイオン散乱の強度を計算機実験により解析した。これらはある程度実験結果を説明するが、低速電子線回折の動力学的解析により得られている提案が、最もよく実験結果を説明することを結論した。またタングステン（100）表面については、現在有力なモデルとして、室温においては表面原子の変位にある程度の分布を許すものが提案されている。これについても、高エネルギーイオン散乱の実験結果の解釈として、実験の論文に述べられたやや不自然なモデルが残されたままであった。申請者は実験結果の詳細の検討を行い、現在有力とされているモデルに基づく表面原子の変位の分布を決定した。以上本論文は複雑な再構成表面の高エネルギーイオン散乱の理論解析に新しい途を開いたものとして学位論文に値するものである。