

Title	Ion-Desorption and Photoemission Studies of NO, O <sub>2</sub> and K Adsorbed Si(III) Surfaces
Author(s)	坂本, 一之
Citation	大阪大学, 1994, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://doi.org/10.11501/3075136">https://doi.org/10.11501/3075136</a>
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

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

Osaka University

氏名	坂本 一之
博士の専攻分野の名称	博士(理学)
学位記番号	第 11415 号
学位授与年月日	平成 6 年 3 月 25 日
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当 基礎工学研究科物理系専攻
学位論文名	Ion-Desorption and Photoemission Studies of NO, O <sub>2</sub> and K Adsorbed Si(111) Surfaces (イオン脱離と光電子分光による NO, O <sub>2</sub> , K 吸着 Si(111) 表面の研究)
論文審査委員	(主査) 教授 菅 滋正 (副査) 教授 張 紀久夫 教授 冷水 佐壽

### 論文内容の要旨

Si(111) 表面上の吸着状態ならびにイオンの脱離過程を電子線と光を用いて研究した。O<sub>2</sub>/Si(111) 表面に関しては電子刺激脱離 (ESD) を用いて、NO/Si(111) 表面に関しては ESD と光刺激脱離 (PSD) の両方の手法を用いて研究を行った。また、角度分解光電子分光 (ARUPS) により Si(111)3×1-K 表面の電子状態を調べた。

O<sub>2</sub>/Si(111) の ESD の実験は室温で行った。低露出量 (1L, 2L) においては脱離イオン種として H<sup>+</sup>, O<sup>+</sup> と O<sub>2</sub><sup>+</sup> が観測された。この表面の ESD の実験で O<sub>2</sub><sup>+</sup> が観測されたのは初めてのことである。酸素の露出量を増やすと (4L 以上) 観測されるのは H<sup>+</sup> と O<sup>+</sup> のみであった。このように吸着量が増すと O<sub>2</sub><sup>+</sup> の信号が消失することより、室温では酸素の吸着量が少ないときのみ分子状吸着種が存在し、吸着量が多いときには解離して吸着すると考えられる。電子刺激脱離イオンの放出角度分布 (ESDIAD) のパターンより分子状吸着種は on-top-site に吸着していることが分かった。また 1L で、その寿命と活性化エネルギーはそれぞれ 8 時間と 0.55 eV と求められた。

室温における NO/Si(111) の ESD の実験では脱離イオン種として H<sup>+</sup> と O<sup>+</sup> が観測された。190K における ESD では、それらに加えて初めて N<sup>+</sup> も観測された。脱離イオンの運動エネルギー分布より、異なる運動エネルギーを持つ 2 種の N<sup>+</sup> があることが分かった。また、ESDIAD パターンよりこの 2 種が NO の 2 つの異なる吸着サイトと対応することが分かった。一方 PSD の実験は 90K で行われ、脱離イオン種として ESD で観測された 3 種以外に NO<sup>+</sup>, O<sub>2</sub><sup>+</sup> と N<sub>2</sub>O<sup>2+</sup> が PSD の実験として初めて観測された。UPS スペクトルと、PSD における脱離イオンの励起エネルギー依存性を比較検討した結果、分子状に吸着している NO の 3σ 分子軌道 (主に O の 2s) を励起することによって N<sup>+</sup> が脱離することが分かった。このことから、NO は Si 原子上に Si-O-N のように吸着していると考え、N<sup>+</sup> の脱離モデルとしてはオージェ過程を介して起こる KF モデルが適当であると考えた。

Si(111)3×1-K 表面の表面電子状態を [112̄] と [101̄] の 2 つの方向について ARUPS で研究した。Si(111)3×1-K 表面と Si(111)7×7 清浄表面のスペクトルを比較することにより、3×1-K 表面はもはや 7×7 表面のように金属的ではなく、半導体的であることが分かった。また、パッドマッピングを行った結果、6 つの表面準位が存在することが分かり、そのうちの 1 つの分散の特徴から 3×1-K 表面には π ボンドチェーンが存在すると考えた。また、XPS における Si LVV オージェ電子と K 2p 内殻光電子のピーク強度の比を、飽和被覆率 1ML であると考えられる Si(111) δ7×7-K の値と比較して、3×1-K 表面の飽和被覆率は 1/3ML であると考えた。以上の結果から、Si(111)3×1-K 表面の新しい構造モデルを提唱した。

## 論文審査の結果の要旨

本論文はSi半導体表面について、イオン脱離や光電子分光の手法により種々の分子吸着状態や金属原子吸着状態を解明したものである。

第1章ではSi(111) 清浄表面の原子配置モデルやイオン脱離モデルの紹介に引き続き、電子線刺激イオン脱離の角度分解測定や光電子の角度分解測定装置および2次元表示型半球鏡面分析器について述べてある。

第2章以下では実験結果および考察を行ってある。まず第2章ではO<sub>2</sub>を吸着したSi(111) 表面の電子線刺激脱離(ESD)の研究をまとめている。実験は室温で行い酸素被覆率 $\theta$ が小さいときのみ分子状吸着種が存在し、 $\theta$ が大きくなると解離吸着することが分かった。放出イオンの角度分解測定(ESDIAD)より分子状吸着種はon-topサイトに吸着していると考えられる。

第3章ではNOを吸着したSi(111) 表面のESDを190Kで、光刺激脱離(PSD)を90Kで測定した。まず190KにおけるESDの放出N<sup>+</sup>イオンの運動エネルギー分布より非等価な2種のN<sup>+</sup>が存在することが分かった。放出N<sup>+</sup>イオンの角度分布も2種類の典型的なパターンがありそれらはNO分子がSiに吸着する際、NO分子軸が表面に垂直な場合と斜めの場合とがあることを示している。一方90Kで放射光を用いて飛行時間差法(TOF)で行われたPSDの測定よりNOの3 $\sigma$ 分子軌道(主にOの2s状態に対応)を励起する事によりN<sup>+</sup>が脱離する事が分かった。この事は低温ではNO/Si(111) 表面上でのN<sup>+</sup>の脱離がオージェ過程を経由して起こるKFモデルで説明できることを示唆する。

第4章ではKを吸着したSi(111) 表面の電子状態と表面原子配置を放射光を用いて研究した結果を述べてある。測定は3 $\times$ 1-K表面について光電子の波数を $[\bar{1}12]$ ,  $[\bar{1}01]$ の2方向に掃引する形の角度分解測定で行った。7 $\times$ 7清浄表面が金属的であるのに対し、3 $\times$ 1-K表面は半導体的である。角度分解測定からは表面電子帯として少なくとも6つの分枝が存在することが分かった。そのうち最も束縛エネルギーの小さいバンドは $\pi$ ボンドチェーンであると結論される。またSiのLVVオージェ電子とKの2p内殻光電子放出強度を3 $\times$ 1-K表面と $\delta$ 7 $\times$ 7-K表面とで比較することより、3 $\times$ 1-K表面の飽和吸着量はこれまで言われていた2/3MLではなくて1/3MLであることがわかりこの結果よりSi(111) 3 $\times$ 1-K表面の新しい構造モデルを提唱している。

以上の研究成果は学術的に極めて評価の高いものであり博士(理学)の学位論文として価値有るものと認める。