

Si(111)-(7×7)表面の準安定吸着酸素

東北大院理 坂本一之

電気産業界において最も重要な主題の1つであるナノメートルスケールデバイスの作成を確立させるためには、ナノメートルスケールの絶縁体の作成が不可欠である。このような絶縁体の候補の1つにナノメートルスケール SiO₂ が挙げられ、その形成・制御には原子レベルでの Si の酸化過程の理解が必須である。現在のところ、Si(001)-(2×1)表面が layer by layer で酸化することが知られているのに対し、Si(111)-(7×7)表面の酸化過程は初期過程において準安定吸着酸素が存在することから完全に理解されていない。この準安定吸着種を介して酸化が進行することから、これまで高分解能電子エネルギー損失分光 (HREELS) [1,2]、光電子分光(UPS)[3-5]、O 1s 内殻光電子分光[5,6]、走査トンネル顕微鏡(STM)[7]などの実験手法や理論計算[8,9]により、原子レベルでの Si の酸化過程の理解に不可欠である準安定酸素の吸着構造が研究されてきた。しかしながら、準安定吸着酸素が有限の寿命を持つことなどから、その吸着構造が原子状であるか分子状であるかすら決定されていない(図1)。

準安定吸着酸素の吸着構造とその吸着過程を決定するため、酸素の曝露量に対する Si(111)-(7×7)表面のアダトム、レストアトムとバックボンドによる表面準位の振る舞いが顕著に観測できる測定配置 (a) ($\theta_i=45^\circ$, $\theta_e=15^\circ$)と(b) ($\theta_i=45^\circ$, $\theta_e=20^\circ$)、および Si 基板の影響が弱く吸着酸素に起因する準位がはっきりと観測される測定配置 (c) ($\theta_i=0^\circ$, $\theta_e=60^\circ$)で UPS 測定を行った。ここで、 θ_i と θ_e はそれぞれ表面法線方向よりの光の入射角と光電子の出射角を示している。図2に3つの配置で測定した Si(111)-(7×7)清浄表面と表面に酸素を 0.5L 曝露した後のスペクトルを示す。(a)と(b)において酸素の吸着による表面準位の消失や強度減少が観測され、(c)では酸素吸着による準位を binding energy=2.1、3.8、5.1、6.4 と 7.5eV にはっきりと観測された。これらの準位のうち 2.1、3.8 と 5.1eV の準位は試料を 600K でアニールした後に消失し、6.4 と 7.5eV のピーク強度がアニール後増大することから前者を準安定酸素準位、後者を酸素が解離吸着した安定酸素準位であると結論付けた。曝露量に依存した酸素準位の変化を観測したところ、安定酸素準位の強度が 10L まで増加するのに対し、準安定酸素準位の強度は 2L で飽和した。強度が同じ曝露量依存性を示すことから3つの準安定酸素準位が1つの吸着構造に起因することを意味する。また、酸素の曝露に対する表面準位の強度変化との相関から、前駆体と言われてきた準安定酸素は酸素原子が Si アダトムのバックボンドに吸着した後、ダングリングボンドに吸着する二次吸着過程であることを求めた。

本講演では、上記の UPS の結果と STM を組み合わせることによって得た準安定酸素の吸着サイトや O 1s 内殻準位測定により得た吸着構造モデルについても述べる予定である。

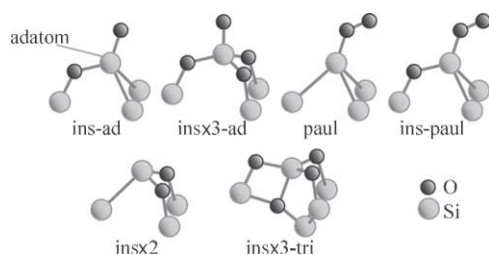


図1：これまで提案された準安定酸素の吸着構造(上段)と安定酸素の吸着構造(下段)。

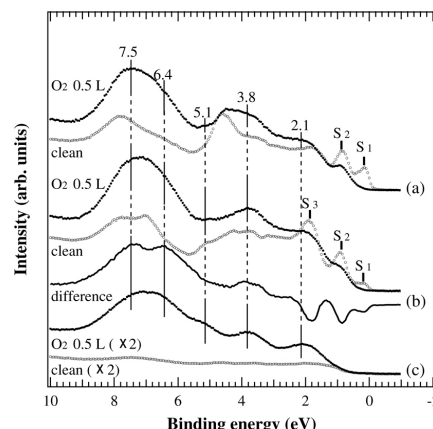


図2：3つの異なる実験配置で測定した Si(111)-(7×7)清浄表面と表面に酸素を 0.5L 曝露した後の UPS スペクトル。

[1] H. Ibach *et al.*, Appl. Phys. A: Solids Surf. **29**, 113 (1982).
[2] K. Sakamoto *et al.*, Surf. Sci. **357/358**, 514 (1996).
[3] G. Dujardin *et al.*, Phys. Rev. Lett. **73**, 1727 (1994).
[4] G. Comtet *et al.*, Surf. Sci. **352-354**, 315 (1996).
[5] U. Hofer *et al.*, Phys. Rev. B **40**, 1130 (1989).
[6] B. Lamontagne *et al.*, Prog. Surf. Sci. **50**, 315 (1995).

[7] Ph. Avouris *et al.*, J. Vac. Sci. Technol. B **9**, 424 (1991).
[8] B. Schubert *et al.*, J. Chem. Phys. **98**, 7593 (1993).
[9] S.-H. Lee and M.-H. Kang, Phys. Rev. Lett. **82**, 968 (1999).