

2000S2-003:

## 表面X線回折法による半導体と金属および絶縁体の界面構造と物性研究

研究代表者：高橋敏男（東大物性研）

実験組織：隅谷和嗣、田尻寛男、中谷信一郎、星野崇、野積洋介、野島昭信

青山朋弘<sup>1</sup>、秋本晃一<sup>1</sup>、久田祥之<sup>2</sup>、向中野信一<sup>2</sup>、榎本貴志<sup>3</sup>

永田一夫<sup>4</sup>、矢代航<sup>5</sup>、杉山弘<sup>6</sup>、張小威<sup>6</sup>、河田洋<sup>6</sup>

（東大物性研、名大院工<sup>1</sup>、（株）デンソー・基礎研<sup>2</sup>、豊田高専<sup>3</sup>、電通大<sup>4</sup>、産総研<sup>5</sup>、KEK物構研<sup>6</sup>）

課題有効期間： 2000年4月－2003年3月

実験を実施したステーション名： BL-15B2

今までに実施したビームタイム2002年度： 79.6日

研究目的：

本研究課題はS1課題(97S1-003)「表面X線回折法による結晶成長素過程の研究」(1997年4月－2000年3月)をうけて、さらに研究を推進するための課題である。半導体表面に金属や半導体を1原子層程度から数10原子層程度まで結晶成長させた試料について、それらの界面構造や超薄膜結晶の構造をX線回折法により解析し、それらの構造と物性との関連を研究することを目的としている。

研究成果：

### 1) 室温および低温Si(111) 3×3-Ag構造

Si(111)7×7清浄表面にAgを1原子層程度蒸着したときにできる3×3-Ag構造の温度依存性を表面X線回折法により調べた。室温ではAg原子が対称性の高い3角形の配置(p31m)をとるHCT(Honeycomb Chained Triangle)構造、低温ではHCT構造においてAgの三角形が回転して対称性が低く(p3)なったIET(InEquivalentTriangle)構造であることを支持する結果を昨年度までの研究である程度得ている。今年度はさらにいくつかの温度で回折強度分布を測定するとともに、詳しい解析を行った。相転移温度以下で出現する散漫散乱は、互いに回転方向が異なる右回転したIET構造と左回転したIET構造が存在することによる生じるとして解釈できること、さらに、そのIET構造のドメインサイズの温度依存性を求めた。その結果は、3×3-Ag表面にさらにAg薄膜をエピタキシャル成長させるときの結晶性の温度依存性も説明できることが分かった。この散漫散乱の温度依存性から相転移温度が150K±4Kであることを決定した。このことから室温構造は高温相に属することが明らかになった。室温ではHCT構造の方が実験結果をよく説明するが、高温では、格子振動の効果が相対的に重要になるので、相転移温度より高い温度の測定データも含めて詳しく解析を進めている。

### 2) 表面X線回折法によるSiC(0001)3×3構造の研究

環境問題から精力的に開発が進められている電気自動車においては、大きな電流を効率よく制御する必要がある。現在市販されているハイブリッドカーにおいても制御する電流はすでに1台あたり600アンペア程度である。そこでSiよりも高耐圧(電圧)のシリコンカーバイド(SiC)をデバイスとして用いることが考えられている。しかし、SiCはその表面構造の制御がSiよりも困難であり、デバイス作製の障害となっている。

本研究ではSiCの表面構造について、表面X線回折法により構造解析を行った。SiC(0001)3×3構造は最も盛んに研究されている表面構造の一つで、様々なモデルが提案されてきた。3×3構造を発見したKaplanはDASモデルであると提案した。Kulakovらはユニットセルあたり11個のSi原子からなるモデルを提案した。LiらはSiあるいはSiとCのピラミッドクラスターからなるモデルを提案した。近年、Schardtらはユニットセルあたり13個のSi原子からなり、Kulakovらのモデルで見られるコーナーホールを埋めたモデルを提案した。

本研究では、実験で測定した回折強度から求めたパターン図と、前述した構造モデルから計算して求めたパターン図を比較することにより、今回の実験で得られた3×3構造を解析した。その結果、3×3構造はKulakovあるいはStarkeモデルである可能性が高いことがわかった。