

2006S2 003 表面X線回折法による半導体表面構造の解析と界面構造の制御

実験組織 研究代表者 秋本晃一 (名古屋大学大学院工学研究科)

名古屋大学大学院工学研究科 (Voegeli Wolfgang、浦田朋晃、伊藤勇希、吉田広徳、小林広明、松長徹郎)、東京大学物性研究所 (高橋敏男、白澤徹郎、橋本光博)、東京大学大学院新領域創成科学研究科 (新井大輔、野島健大、岩沢勇作、関口浩司)

課題有効期間 2006年4月~2008年3月

ステーション(ビームタイム) BL15B2 (70日(2006年度))

研究目的と特徴

6軸表面X線回折装置を用いて、半導体表面構造及び界面形成の初期過程について研究することを目的とする。特に次世代の半導体開発において重要な表面界面の構造について、研究を行う。また、走査トンネル顕微鏡では研究できない表面原子の熱振動など、表面の電子密度分布を求める研究まで視野に入れた精密な表面構造解析をS2課題(2003S2-001)に引き続き行う。本研究では、これまでにS1課題(97S1-003)で立ち上げ、S2課題(2000S2-003)で整備した6軸表面X線回折装置及び共同開発研究で開発した低温用試料マニピュレータを利用する。

研究成果(2006年度)

(1) InP 表面構造の研究

化合物半導体 InP は Si の nMOSFET と融合させ、現在の CMOS の劇的な性能向上が期待されている材料の一つである。また、InP (001)面の清浄表面は 2×4 構造をとることが知られている。ここでは InP (001) 2×4 構造について、その原子構造を明らかにする研究を行った。まず実験結果と現在までに提唱されている6つのモデルとの比較を行いこれらのモデルの妥当性を検証した。その結果、この 2×4 表面構造は III-V 属化合物半導体の表面構造について広く提唱されている Mixed-dimer モデルで最も良く説明されることを明らかにした。さらにその原子位置の最適化を行い、面内方向だけでなく表面垂直方向についても精密に原子の座標を求めた。求められた原子位置は第一原理計算により報告されているものに近いが、表面第4層目の原子変位について新たに明らかにすることができた。

(2) Si(111)- 5×2 -Au 表面構造の研究

Si(111)面に1原子層前後の微量の Au 原子を吸着させるといくつかの長周期構造が出現することが知られている。吸着量が 0.4ML 程度のときには Si(111)- 5×2 -Au 構造が形成される。この構造は、Si 基板上の Au が $\langle 110 \rangle$ 方向に1次元鎖状構造をとることが知られており着目されている。本研究では、微小角入射 X線回折法(GIXD 法)を用いて測定を行い、現在 5×2 構造として有力な3つの構造モデルについて妥当性を検討した。その結果、DHC (Double Honeycomb Chain) 構造に Si adatom が付加されたモデルが最も良く測定結果を再現していることがわかった。

発表論文(2006年度)

- (1) W. Voegeli, K. Akimoto, T. Urata, S. Nakatani, K. Sumitani, T. Takahashi, Y. Hisada, Y. Mitsuoka, S. Mukainakano, X. Zhang, H. Sugiyama, and H. Kawata, Structure of the Oxidized 4H-SiC (0001)- 3×3 Surface, *Surface Science*, **601**, 1048-1053, 2007.
- (2) W. Voegeli, K. Akimoto, T. Aoyama, K. Sumitani, S. Nakatani, H. Tajiri, T. Takahashi, Y. Hisada, S. Mukainakano, X. Zhang, H. Sugiyama, and H. Kawata, Structure of the SiC (0001) 3×3 Reconstruction Studied by Surface X-ray Diffraction, *Applied Surface Science* **252**, 5259-5262, 2006.
- (3) K. Sumitani, K. Matsuzawa, T. Hoshino, S. Nakatani, T. Takahashi, H. Tajiri, K. Akimoto, H. Sugiyama, X. Zhang, and H. Kawata, Study of the surface structure of Si(111)- $6\times 1(3\times 1)$ -Ag using X-ray crystal truncation rod scattering, *Applied Surface Science*, **252**, 5288-5291, 2006.
- (4) K. Akimoto, K. Fukagawa, M. Goto, and F. Honda, Crystal orientation changes of Ag thin films on the Si(111) substrate due to tribo-assisted recrystallization, *Thin Solid Films* **515**, 444-447, 2006.