

### 3d 遷移金属シリサイドの価電子帯構造 ～軟X線発光分光と広波長域光電子分光～

中島伸夫<sup>A</sup>、江見和展<sup>A</sup>、飛田尚寿<sup>A</sup>、圓山裕<sup>A</sup>、手塚泰久<sup>B</sup>、仲武昌史<sup>C</sup>、生天目博文<sup>C</sup>、谷口雅樹<sup>A,C</sup>

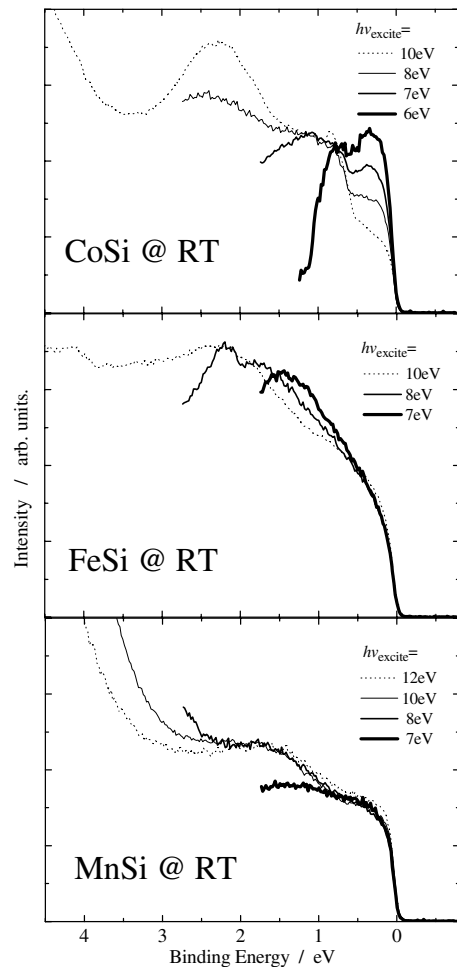
<sup>A</sup>広島大院理、<sup>B</sup>弘前大院理、<sup>C</sup>広島大放セ

半導体である Si は、近代電子産業を支える基礎物質として必要不可欠なものである。Si 基板上に磁性元素である遷移金属を蒸着し薄膜を作製すると、界面で様々な物性を示すシリサイドが形成され、太陽電池やフラッシュメモリなどに広く応用されている。しかし、シリサイドの形成過程は複雑である一方、デバイスのサイズは益々高微細化していくため、シリサイド形成の過程を明らかにすることは極めて重要な課題になっている。筆者らは、シリサイドの価電子帯構造のうち、特に Si の部分電子状態を明らかにすることを直接の目的とし、シリサイド形成過程の理解の進めることを目指している。

最近、X線蛍光分光法(XFS)により、3d 遷移金属シリサイドにおいて、Si から遷移金属への電荷移動が起こっていると Liu らにより報告されており[1]、電子状態に対する Si の役割が無視できないことが分かってきた。彼らは、電荷移動量は Si を取り囲む遷移金属の数に依存して増加すると結論している。一方、Menzel らは、赤外から真空紫外領域の楕円偏光解析により、遷移金属(TM)から Si へ電荷移動が起こり、移動量は TM に依らずほぼ電子 3 個であると予想している[2]。両者は全く正反対の結論である。いずれにせよ、良く知られたリジッドバンドモデルは単純には適用できないことになる。

そこで、我々は極低エネルギー（6eV）から高エネルギー（3.5keV）の広いエネルギー範囲の放射光を用いた価電子帯光電子分光実験を行い、光イオン化断面積( $\sigma$ )の違いを利用した部分状態密度の測定を行った。（ $\sigma_{Si\ 3s}$  および  $\sigma_{Si\ 3p}$  は VUV～軟X線領域では極めて小さいが、硬X線領域では、 $\sigma_{TM\ 3d}$  と同程度になってくる。）Mn から Co へと TM を変化されると、TM 3d 電子数が増えるはずであるが、結合エネルギー5eV に現れる TM 3d の部分状態密度の強度は逆に弱くなるのが分かった。これは、TM 3d 電子が p-d 混成を介して Si 3p 軌道に流出していることを示唆している。この結果は、XFS の結果と正反対である。TM→Si という電荷の移動は、以前筆者らが測定した Si 2p 軟X線発光分光の結果とも矛盾しない。

また、CoSi では  $E_F$  直下に Si 3p の部分状態密度が存在することが極低エネルギー励起の光電子測定から明らかになった(図参照)。3d 遷移金属シリサイドの磁性や電気伝導性に Si が大きな役割を担っていることが示唆される。



図：極低エネルギー光励起による TMSi(TM=Mn, Fe, Co)の価電子帯光電子スペクトル

[1] Z. Liu *et al.*, Phys. Rev. B **69**, 035106 (2004);

H. Ishii *et al.*, Phys. Rev. B **71**, 205202 (2005).

[2] D. Menzel *et al.* private communication;

VUV-XV ID87.