

論文 / 著書情報  
Article / Book Information

|                   |   |
|-------------------|---|
| 題目(和文)            | X線回折によるAg/Si(111) 3x 3-B界面構造の研究   |
| Title(English)    |   |
| 著者(和文)            | 吉池雄作  |
| Author(English)   | Yusaku Yoshiike   |
| 出典(和文)            | 学位:博士(工学),<br>学位授与機関:東京工業大学,<br>報告番号:甲第10833号,<br>授与年月日:2018年3月26日,<br>学位の種別:課程博士,<br>審査員:平山 博之,中辻 寛,合田 義弘,平松 秀典,舟窪 浩   |
| Citation(English) | Degree:Doctor (Engineering),<br>Conferring organization: Tokyo Institute of Technology,<br>Report number:甲第10833号,<br>Conferred date:2018/3/26,<br>Degree Type:Course doctor,<br>Examiner:,,,,, |
| 学位種別(和文)          | 博士論文  |
| Category(English) | Doctoral Thesis   |
| 種別(和文)            | 論文要旨  |
| Type(English)     | Summary   |

## 論文要旨

THESIS SUMMARY

|                         |       |    |  |                 |      |
|-------------------------|-------|----|--|-----------------|------|
| 専攻：<br>Department of    | 材料物理学 | 専攻 | 申請学位（専攻分野）：<br>Academic Degree Requested | 博士<br>Doctor of | （工学） |
| 学生氏名：<br>Student's Name | 吉池 雄作 |    | 指導教員（主）：<br>Academic Supervisor(main)    | 平山 博之           |      |
|                         |       |    | 指導教員（副）：<br>Academic Supervisor(sub)     | 中辻 寛            |      |

### 要旨（和文 2000 字程度）

Thesis Summary (approx.2000 Japanese Characters)

本研究では Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -B 表面上にエピタキシャル成長した Ag 超薄膜から成る系について、過去の走査トンネル顕微鏡 (STM) 観察により現れていた topographic な  $3\times 3$  周期構造が真に界面の構造に起因するものかどうかを調べる事を目的として、界面の X 線 CTR 散乱の測定を実施し、構造解析を行った。

第一章では半導体基板表面上に成長した金属超薄膜から成る系について、原子レベルで界面の構造を調べる事の重要性を述べた上で、実際に先行研究による X 線回折 (XRD) 及び STM を用いた Ag/Si(111)、及び Pb/Si(111) 界面構造の測定結果について述べた。

第二章では測定に用いた X 線の原理に触れた上で、本研究で用いた表面 X 線回折 (SXRD) 装置、STM、及び反射高速電子線回折 (RHEED) の測定手法や原理について述べた。

第三章では SPring-8 にて実施した、B 原子の  $1/3$  ML ドープされた Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -B 表面の X 線構造解析を行った結果を述べた。Si(111) 表面に B 原子をドープさせると、最表面の  $T_4$  サイトでなくサブレイヤーの  $S_5$  サイトに吸着し、安定な構造をとる事が知られている。しかしながら、一部の  $S_5$  サイトには B 原子が未知間のままによる欠陥構造が必然的に散在し、この数密度はアニーリングの処理時間によって変化する。これまでの先行研究による実験側の構造解析・DFT 計算では正常な構造のみに着目しており、上記の欠陥構造を考慮していない。そこで本研究では欠陥の数密度をアニーリングの処理過程により 10% にコントロールし、この構造も考慮して X 線 CTR 散乱プロファイルの運動学的なフィッティング計算を行った。計算では、ビームラインの担当者が自作された構造因子が干渉項と非干渉項の和で表される仕様のプログラムを用いた。これにより正常な構造と欠陥構造の比率評価を正確に行う事が可能である。計算に採用した初期座標値は DFT 計算による先行研究の結果を採用した。初期座標値による計算カーブのプロファイルは、実験プロットのプロファイルに著しく整合する傾向が見られた。フィッティング計算から得られた R 因子の値は 0.15 であった。これは計算カーブのプロファイルと実験プロットのプロファイルが 85% 整合している事を示している。構造解析から得られた正常な構造は、DFT 計算による先行研究の結果に一致していた。一方で、実験側の構造解析の結果とでは一部の構造パラメータに違いが見られた。この違いは、実験側の構造解析では欠陥構造を考慮していなかった事に起因するものと思われる。従って、本研究では欠陥構造を加味してフィッティング計算を行ったことにより、実験側の先行研究の示す構造と比較して精度の良い構造が得られた。

第四章では SPring-8 にて実施した、Ag/Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -B 界面の X 線構造解析を行った結果を述べた。実験では、第三章で述べた Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -B 表面上に Ag を 100 K でエピタキシャルに Electronic Growth (EG) 成長させて試料温度が室温程度となるまでアニールアウトさせ、その後 250 °C で 5 min のアニール処理を行った。尚、EG 成長を行う事で基板表面上に full coverage で Ag 超薄膜が形成され、アニール処理を行う事で膜の結晶性が向上し、室温成長時の Ag 超薄膜表面で STM 観察された topographic な  $3\times 3$  周期構造が同様に現れている事を STM 観察により明らかにしている。作成した Ag/Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -B 界面による面内のロッキングカーブ測定から、 $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$  rod では強度の高いシャープな回折ピークが観測された。一方、 $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$  rod の重なっていない  $3\times 3$  rod では強度の弱いブロードなピークが観測された。作成した Ag 超薄膜表面の RHEED パターンにはこれらの超格子による回折スポットが観測されなかった事から、観測されたピークは Ag/Si(111) 界面構造の周期性を反映するものと考えられる。X 線 CTR 散乱プロファイルのフィッティング計算では、Si 側は第三章で述べたフィッティング計算で得られた構造を初期座標値に採用した。一方、Ag 側はバルク格子による構造を初期座標値に採用した。また、Ag/Si(111) 界面では 3 通りの原子配置による初期モデル (model1, 2, 3)、同時に Si adatom が抜けている初期モデル (model1', 2', 3') を考案し、計算を行った。初期座標値による計算から、界面では Si adatom が保持されているモデル (model1~3) が優位である事が明らかとなった。これより、model1~3 に対して最下層、及び第二層目の Ag(111) 格子による構造パラメータを緩和させてフィッティング計算を行った結果、界面では計算で着目している単位胞のコーナーに位置する Si adatom の真上に Ag 原子が位置している model1 が最も優位であることが明らかとなった。フィッティング計算から得られた model1 の各 Ag 層の面内の各原子の変位の大きさは、バルク Ag(111)  $1\times 1$  格子による長さ (=2.89 Å) の 10% 以下であった。これより得られた構造は unrealistic な原子配置をとっているものではない事がわかった。一方、面直方向の各層の原子配置は最下層では単位胞のコーナーで 0.22 Å、第二層目では 0.08 Å を振幅にもつ  $3\times 3$  の corrugation が形成されていることが明らかとなった。Ag 超薄膜表面の STM 観察で現れていた  $3\times 3$  周期構造の振幅はラインプロファイルによる評価から 0.03 Å が得られた事から、界面で形成された  $3\times 3$  の corrugation の振

幅が、Ag 膜垂直方向に伝播していき、Ag 最表面まで及んだ事が考えられる。  
第五章では本研究による結果及びその考察を総括した。

備考：論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。

Note : Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1copy of 800 Words (English).

注意：論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。

Attention: Thesis Summary will be published on Tokyo Tech Research Repository Website (T2R2).

(博士課程)  
Doctoral Program

## 論文要旨

THESIS SUMMARY

|                          |       |    |  |                 |      |
|--------------------------|-------|----|--|-----------------|------|
| 専攻 :<br>Department of    | 材料物理学 | 専攻 | 申請学位 (専攻分野) :<br>Academic Degree Requested | 博士<br>Doctor of | (工学) |
| 学生氏名 :<br>Student's Name | 吉池 雄作 |    | 指導教員 (主) :<br>Academic Supervisor(main)    | 平山 博之           |      |
|                          |       |    | 指導教員 (副) :<br>Academic Supervisor(sub)     | 中辻 寛            |      |

要旨 (英文 300 語程度)

Thesis Summary (approx.300 English Words)

In this study, we investigated the structure on bare Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -B surface and Ag/Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -B interface using surface X-ray diffraction (SXRD). In the experiments, the intensity profile of crystal truncation rods (CTRs) and fractional order rods (FORs) were obtained. In the analysis, we conducted the Least squares fitting calculation based on the kinematical theory.

In the Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -B structural analysis, we adopted defect structural model that several previous studies were not considered as well as normal structural model. The calculated result indicated the geometry of the normal structure was in good agreement with the previous DFT study. However, there was discrepancy between the previous experimental studies on the partial structural parameters. This discrepancy was derived from the condition that the previous experimental studies did not consider the presence of the defect structure. Accordingly, we consider the more precise Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -B structural model was obtained due to adopting the defect structure.

As for the Ag/Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -B interfacial structure, we found the  $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$  and  $3\times 3$  periodicity was formed at the Ag/Si(111) interface since these diffraction pattern was not observed in the RHEED pattern. Owing to this, we constructed three interfacial structural models (model1, 2, and 3). At the same time, the model that the Si adatom layer was not preserved at the Ag/Si(111) interface is considered (model1', 2', and 3'). The calculated result for the initial structural model showed the Si adatom is preserved at the interface. Accordingly, we conducted the fitting calculation with model1, 2, and 3. As a result, we clarified the model1 indicating the Ag atom is put on a specific Si adatom site was the most suitable in every models. Furthermore, the  $3\times 3$  periodic corrugation was formed at the Ag(111) bottom layer with an amplitude of 0.22 Å. At the second layer, the amplitude was 0.08 Å, and the 0.03 Å in the previous STM observation. These results suggested that the amplitude of this corrugation was transferred to the upper most layer of the Ag(111) surface.

備考 : 論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。

Note : Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1 copy of 800 Words (English).

注意 : 論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ (T2R2) にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。

Attention: Thesis Summary will be published on Tokyo Tech Research Repository Website (T2R2).