

氏名(本籍)	木村知彦(茨城県)		
学位の種類	博士(工学)		
学位記番号	博甲第3854号		
学位授与年月日	平成17年9月30日		
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当		
審査研究科	数理物質科学研究科		
学位論文題目	Si(100)表面低温相のSTM		
主査	筑波大学教授	工学博士	重川秀実
副査	筑波大学教授	理学博士	秋本克洋
副査	筑波大学助教授	理学博士	中村潤児
副査	筑波大学助教授	博士(工学)	佐々木正洋
副査	筑波大学助教授	工学博士	岡田至崇

論文の内容の要旨

Si(100)表面の切断面は、Si原子あたり二つの不対電子(ダングリングボンド)を有し、そのままでは非常に不安定なことから隣同士の原子が結合しダイマー(二量体)を形成することでダングリングボンドを減らし安定化する。表面再構成によって形成される構造としては3つの構造が存在することが知られている。一つは、 2×1 倍の周期を持った対象ダイマー構造、他の2つは、ダイマーが傾いてできる構造(バックルダイマー)からなり、隣り合うダイマー列間の位相がそろった $p(2 \times 2)$ 構造と逆位相の $c(4 \times 2)$ 構造である。

Si(100)表面は、基礎的にも応用上も重要であるため、40年以上前から多くの研究者により研究が行われてきた。当初、電子線回折(LEED)の実験によって、200K近辺で 2×1 構造から $c(4 \times 2)$ 構造への二次相転移が観察されると共に、低温(120K)での走査トンネル顕微鏡(STM)を用いた実験により、表面上8割の領域において $c(4 \times 2)$ 構造が観察されることが確認された。これらの結果から、室温で観察される対称ダイマー構造は、バックルダイマーのフリップフロップ運動によるものであることが共通の認識となった。

こうして、 $c(4 \times 2)$ 構造がSi(100)表面の基底状態であると広く受け入れられるに至ったが、近年さらに温度を下げた6K程度の低温において、非常に広い範囲で $p(2 \times 2)$ 構造が観察され、 $c(4 \times 2)$ 構造と $p(2 \times 2)$ 構造の間で大きく揺らぐ様子がSTMで観察された。また、ドーパントの種類やドーパ量の違いによっても、観察される構造/振る舞いが異なるという結果も報告されており、80Kあたりで観察される表面構造や振る舞いとは少々異なる可能性がでてきた。その後、STMやLEEDの実験により40K近辺における相転移の存在が示唆され始め、20Kや5Kにおいて対称ダイマー構造が観察されたという報告もあり、対称ダイマーが基底状態である可能性も考えられた。その後、4.2Kにおいて $c(4 \times 2)$ 構造と $p(2 \times 2)$ 構造が試料-探針間に加えるバイアスの条件によって操作できことを示し、バイアス電圧を高くすると $p(2 \times 2)$ 構造が現れるという結果から $c(4 \times 2)$ 構造が最安定構造ではないかと結論づけた報告もなされた。LEEDを用いた研究においても、40K以下の温度で 4×2 のスポット強度が減るといった報告もされている。

このように極低温においても、表面構造は複雑に変化することが分かってきた。実際、第一次原理計算などの理論計算より、どの構造がより安定であるかを求め、c (4×2) と p (2×2) 二つの構造間のエネルギー差は 1meV のオーダーしかないと分かっており、どのような計算式を用いると厳密な計算結果が得られるか非常に難しく、このことから、どの構造が最安定構造であるか、どのような振る舞いをしているのかなど、見解の一致を得るに至っていない。

本研究では、Si (100) 表面低温相に関する混沌とした状況を打開することを目的として、STM および LEED を用いることにより、同低温相の問題に関する詳細な検討を行った。その結果、まず、(1) 高バイアス側では、非弾性トンネル過程によりフリップフロップ運動が誘起されることを初めて確認すると共に、(2) 位相欠陥である P 欠陥のダイナミクスの観察から、低バイアス側でも、表面相が探針の影響を強く受けることを始めとして正しく評価することに成功した。さらに、(3) こうした効果を取り除いた表面では、p (2×2) 構造が安定相である可能性が高いことを明らかにした。続いて、エネルギー差の微妙な二つの競合する相構造が存在する表面における吸着過程に注目し、同じく、(4) STM および LEED を用いて、下地の構造変化を含む、興味深い吸着過程を初めて観察すると共に、(5) 希ガス成長の解析から、清浄表面の構造に関しても、p (2×2) 構造がより安定な構造であることを支持する結果を得た。

審 査 の 結 果 の 要 旨

Si (100) 表面低温相に関する混沌とした状況を打開することを目的として、先端技術である低温の走査トンネル顕微鏡 (STM) および通常では測定が困難な領域での低速電子線回折 (LEED) 測定を用いることにより、同低温相の問題に関する詳細な検討が行われている。その結果、非弾性トンネル過程の存在を始め、表面相が探針の影響を強く受けることを始めて正しく評価することに成功し、こうした効果を取り除いた表面では、p (2×2) 構造が安定相である可能性が高いことを明らかにした。また、エネルギー差の微妙な二つの競合する相構造が存在する表面における吸着過程に注目し、希ガスの吸着過程を、STM および LEED を用いて解析することにより、通常、閉核構造を持ち相互作用が少ないとされている希ガス原子と、下地基板との相互作用の存在を確認するとともに、下地の構造変化を含む、興味深い吸着過程を初めて観察している。希ガス吸着の結果から、先の、清浄表面の構造に関して、p (2×2) 構造がより安定な構造であることを支持する結果も得ている。

以上の結果は、これまで非常に重要であるにも関わらず、一致した見解を得ることができなかった、Si (100) 表面低温相の理解を格段に進めるものとする。

よって、著者は博士 (工学) の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。