

審査の結果の要旨

論文提出者氏名 隅 谷 和 嗣

Si(111)表面上に Ag を吸着させた表面構造は金属/半導体表面の代表的な系であり最も盛んに研究が行われている表面の一つである。なかでも本論文で取り上げている Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag 表面および Si(111)- 6×1 -Ag 表面は Ag/Si(111)表面・界面の形成において基礎となる表面であり、Si-Ag 原子間の相互作用を知るうえで重要な情報を与えると期待される。またこの 2 つの表面はいずれも温度に依存して相転移を示すことが知られている。このような表面における相転移は表面物性の観点から近年活発な議論がなされている分野である。本研究ではこれらの表面構造を詳細に解析し構造を決定するとともに、構造の温度依存性に着目し相転移のメカニズムについて調べている。

本論文は 6 章から構成されている。第 1 章では Ag/Si(111)表面における様々な超構造とそれらの見せる興味深い物性についての紹介が行われ、本研究の目的が述べられている。

第 2 章では表面 X 線回折の原理とその特徴が述べられている。また表面 X 線回折を用いた構造解析の方法が説明されている。

第 3 章では本研究で用いられた実験装置の詳細について記述されている。本研究は X 線源として放射光施設 Photon Factory および SPring-8 を利用して行われており、いずれにおいても超高真空槽と精密多軸回折計を組み合わせた、表面 X 線回折に特化された装置を用いている。また質のよい試料の作製、低温における相転移などの物性の研究といった広い温度領域での試料表面の制御のため、実験に先駆けてマニピュレータを新規に設計・作製している。

第 4 章では Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag 表面の相転移について、特に相転移における表面構造の変化の様子について解析がなされている。そこでは散乱強度の温度依存性の測定からこの表面が変位型相転移の特徴を持っていることが示されている。さらに室温から 50K までの各温度での表面構造が解析されている。その結果、相転移温度以上では honeycomb-chained triangle(HCT)構造、以下では inequivalent triangle(IET)構造をとっていることが示されている。またこの相転移において、表面の Ag 原子の作る三角形の回転角の温度依存性が求められ、回転角がオーダーパラメータとなっていることが示されている。

第 5 章では Si(111)- 6×1 -Ag 表面の構造解析が 3 次元的に行われた。実験手法として GIXD(Grazing-incidence x-ray diffraction)法と CTR(Crystal truncation rod)散乱法を用い、表面面内方向と表面垂直方向の構造がそれぞれ解析されている。GIXD 法による面内構造の解析では、表面の Ag 原子の配列が決定されている。また 500K 以上の高温において現れる 3×1 構造との比較が行われ、 6×1 構造と 3×1 構造の間の相転移が Ag 原子の変位によるものであることが提案されている。一方 CTR 散乱を用いた表面垂直方向の原子配列の

解析では、Ag 原子および再構成した Si 原子の数と原子位置が決定されている。その結果を、これまでに提案されている構造モデルと比較して表面構造に関する考察がなされている。

第 6 章では $\text{Si}(111)\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Ag}$ 表面および $\text{Si}(111)\text{-}6\times 1\text{-Ag}$ 表面について本研究で得られた実験、解析結果のまとめが行われている。

本研究において独創的な点は、表面の原子配列を精密に決定しこれを相転移と関連付けて議論することで温度に依存した表面構造の変化を観測した点である。 $\text{Si}(111)\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Ag}$ 表面の研究では低温で起こる相転移において Ag の回転角がオーダーパラメータであることをつきとめたことである。このように表面における変位型相転移が起こる系は他に報告がなく、本研究において初めて実験的に証明されたものである。またこの結果は $\text{Si}(111)\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Ag}$ 表面の相転移の機構に関するこれまでの議論に明確な道筋をつけるものであり非常に重要な結果である。また $\text{Si}(111)\text{-}6\times 1\text{-Ag}$ 表面の研究では GIXD 法と CTR 散乱法により表面面内および垂直方向の原子配列がそれぞれ解析されている。 $\text{Si}(111)\text{-}6\times 1\text{-Ag}$ 表面構造はこれまで決定されておらず、本研究において初めて詳細な原子位置に関する情報が得られたことになる。また GIXD 法の結果から 6×1 構造と 3×1 構造の間の相転移に関する情報が得られており、この相転移における表面構造の変化を観測した報告としては本研究が最初である。これらの成果は $\text{Si}(111)$ 表面における Ag 原子の振る舞いを理解する重要な手がかりであり、半導体表面の物性研究に大きく貢献するものである。

よって本論文は博士(工学)の学位請求論文として合格と認められる。