

## はじめに

軌道放射物性研究施設 (SOR 施設) は、高エネルギー加速器研究機構・フोटオンファクトリー (PF) に分室を設け、PF に建設・整備した 2 本のビームライン (BL18A および BL19A、B) と 3 基の実験装置: 表面界面光電子分光実験装置 (BL18A)、スピン分解光電子分光実験装置 (BL19A)、軟 X 線発光分光実験装置 (BL19B) を設置し、放射光を利用する物性研究を所内外の研究グループとも協力して行っている。それぞれの実験装置は、実験技術の進歩に合わせて高分解能化、スピン検出効率の性能向上などが実施され、競争力を維持する努力がこれまで続けられてきているが、光源であるアンジュレータ、分光光学系は建設から 20 年が経過してその性能は世界の最先端とは隔たりがある。このため、SOR 施設では 10eV-250eV の真空紫外エネルギー領域をカバーする最新のアンジュレータビームラインへ進化させる計画の策定を検討している。

表記のワークショップは、これまで高輝度光源施設計画の推進のためもあって整備が遅れがちであった BL18A および BL19A、B のリノベーションについて議論することを目的として平成 21 年 12 月 18 日に開催された。ワークショップでは、PF の高度化によって全長 3 m 前後のアンジュレータが設置可能となった BL19 アンジュレータの更新、新しい分光光学系の整備と期待されるビームラインの性能について検討結果が示され、各地の放射光施設で展開されている真空紫外領域の放射光を利用する物性研究の紹介と大きな発展が期待される実験手法、物質科学の新しい分野の開拓につながる研究課題について議論された。タイトなスケジュールにも関わらず、世話人が予想していたよりもはるかに多くの方々 (60 名以上) が参加され、活発な議論がなされたと思う。

本冊子は、ワークショップで講演された方々の講演要旨と使用されたスライドからなる報告書である。

東京大学物性研究所 吉信 淳、柿崎明人、松田 巖  
(ISSP ワークショップ世話人)

# BL19 分光光学系の更新

東京大学物性研究所

藤澤 正美

PF-BL19 の新しい分光光学系を提案する。光子エネルギー範囲は 10~300[eV]、分解能 10,000 程度を目標とする。分光器の型は、不等刻線間隔斜入射平面回折格子分光器で、入射スリットなし、連続偏角可変、とする。斜入射で低光子エネルギーに対応する時、回折限界の分解能に対する寄与が無視できなくなる。今回は、まず回折限界で決まる分解能が全領域で 10,000 を超える様に回折格子の刻線密度係数を決め、回折限界以外の分解能の寄与をレイトレースで評価した。結果は、中心刻線密度 300[本/mm]とした時、上記エネルギー範囲で、Defocus=0 となる刻線密度係数を提案できた。が、この場合、高光子エネルギー側では回折限界以外の因子で決まる分解能も 10,000 程度で、回折限界因子と同程度である。よって、全因子を考慮すると分解能は 10,000 以下となる。高光子エネルギー領域で 10,000 の分解能を実現するには、刻線密度を大きくする必要がある。また、刻線溝深さが 1 つでは、回折効率が十分大きい範囲は限られる。さらに、反射物質を高低エネルギーで変えた方が反射効率も良い。よって、光子エネルギー範囲 10~300[eV]で十分な分解能、明るさを得るには、少なくとも 2 種類の回折格子が必要である。

# 新型アンジュレータの可能性

高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所

山本 樹

高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所フォトンファクトリー（PF）2.5GeV リングにおける東京大学・物性研究所ビームライン BL19 の現行光源 Revolver#19 の後継光源について検討を行った。

PF の運転エネルギー2.5GeV に対して物性研究所側の要求仕様（10eV から数 100eV の光子エネルギー領域をアンジュレータ基本波でカバーすること）を考慮すると、現状と同様の数種類の周期長を持つアンジュレータの建設が必要になる。この場合、現状と同じ Revolver 型のアンジュレータと電磁石を用いたアンジュレータが考えられる。以下に、両者の得失を列挙する。

- I. 伸長された BL19 直線部に適合する、Revolver 方式で周期長を切り替える永久磁石型アンジュレータ（4m長）を建設することは可能である。しかし、選択可能な周期長の場合の数は実際的には2通りが限度であろう。短周期と長周期の周期比は任意に選択できるが、周期磁場／準周期磁場切替え、偏光切替え等の磁場分布に自由度を持たせることには大きな困難を伴う。
- II. 要求される光子エネルギーが比較的低いため、電磁石の利用が实际的である。コイル電流の反転により、短周期とその2倍の長周期磁場の選択が可能である。予備コイルを同じ周期で設置することにより、両者に対して周期磁場／準周期磁場配置を選択することが可能である。さらに水平磁場用コイルを設置することにより円偏光オプションを選択することもできる。

ワークショップでは、期待されるスペクトル、実現方法の見通しを含めた詳細について議論した。準周期磁場配列・偏光切替えを含む柔軟な運転オプションを期待できることから、現在の要求仕様に対して電磁石アンジュレータは有望な選択肢となり得る。

# UVSOR-II 低エネルギーアンジュレータビームラインの現状

分子科学研究所 UVSOR 施設

木村真一

UVSOR では、2003 年に行われたストレージリングの高度化により、最大 3m のアンジュレータが設置できる長直線 4 ヶ所、1m のものが設置できる短直線 2 ヶ所に合計 6 台のアンジュレータが設置可能になった。現在は 4 台が稼働中であるが、そのうちの 2 台は真空封止アンジュレータであり、所内専用ビームライン (BL3U, BL6U) として主に軟 X 線領域の光分子科学に用いられている。共同利用に供されているビームラインとしては、20~200eV で水平直線偏光と円偏光が可能な SPring-8 型のアンジュレータを光源とした汎用三次元角度分解光電子ビームライン (BL5U) と、全長 3m の APPLE-II 型アンジュレータにより水平・垂直直線偏光及び左右円偏光が使用可能な先端研究を行う角度分解光電子ビームライン (BL7U) がある。BL5U では、ユーザーが持ち込んだ分子線エピタキシー装置などの試料準備槽を設置することができ、その場で作成した試料の光電子分光が可能である。一方 BL7U は、6~40eV の領域で試料上の光子密度が  $10^{12}$  個/秒と分解能  $10^4$  を同時に実現する入射スリットレスの Wadsworth 型分光器と、最大取込角  $\pm 18^\circ$  の光電子分析器によって、迅速な角度分解電子分光が可能になっている。最近行われているトップアップのテスト運転では通常運転モードより高分解能測定が可能であり、近い将来に実施される完全トップアップ運転の際には、さらなる性能アップが見込まれている。2011 年には、JST の量子ビーム基盤技術開発プログラムによって最後の長直線にツインアンジュレータが整備され、UVSOR で開発されている真空紫外コヒーレント高調波とテラヘルツコヒーレント放射光の 2 つの新しい放射光を使ったビームラインが建設される計画である。

# HiSOR 低エネルギービームラインの現状

広島大学大学院理学研究科  
木村昭夫

ここ数年における角度分解光電子分光 (ARPES) 測定技術の飛躍的な発展により、これまで物質のエネルギーバンド形状測定にとどまっていたものが、様々な物性現象に関わる準粒子状態の高精度な評価が可能になってきた。とりわけ、低エネルギー放射光を用いることによって、ブリルアンゾーンにおける波数分解能が向上し、運動量分布曲線の波数幅から見積もられる電子の平均自由行程の高精度な評価が可能になった [1]。さらにスピン検出が加われば、スピンと軌道が密接に関わる諸物性の起源解明にも貢献することが期待される。

広島大学放射光科学研究センターHiSOR には2本の挿入光源が設置されており、BL-1 では 26-300eV、一方 BL-9 では 4-30eV のエネルギーの放射光が利用可能である。どちらも VG-Scienta 社の R4000 光電子エネルギー分析器が設置され、国内のみならず欧米やアジア各国の研究者との共同研究が実施されている。本講演では、低エネルギーARPES から得られた Ni (111) 表面状態の電子の準粒子猫像について解説し、走査型トンネル分光測定から得られた結果と比較する [2, 3]。さらにトポロジカル絶縁体表面に現れるスピン分裂状態および電子の散乱過程について議論する [4]。

[1] T. Yamasaki et al., Phys. Rev B **75**, 140513(R) (2007).

[2] M. Higashiguchi et al., Surf. Sci. **601**, 4005 (2007).

[3] Y. Nishimura et al., Phys Rev. B **79**, 245402 (2009).

[4] T. Kadono et al., APL **93**, 252107 (2008).

# スピン分解光電子分光の新展開

## — COPHEE から ESPRESSO へ

広島大学放射光科学センター

奥田太一

次世代の電子デバイスの有力な候補として電子の持つ電荷のみならずスピンの特性を利用するスピントロニクスが注目され、その基礎研究や応用研究が盛んに行われるようになってきている。スピン・角度分解光電子分光法は従来の角度分解光電子分光による固体の電子状態（バンド構造）の詳細な情報に加えてスピンの情報もあらわに得ることができるため、このスピントロニクスの研究においても非常に強力な武器となる。そのため各国で最近再びスピン分解光電子分光を用いた固体分光が盛んに行われる様になってきている。中でもスイスの PSI (Paul Scherrer Institut) の放射光施設 SLS (Swiss Light Source) にチューリヒ大学が建設した、COPHEE (COmplete PHotoEmission Experiment) と呼ばれる装置は、二台の Mott 型スピン検出器を用いることにより電子の持つスピンの方位を 3 次元的に解析する事のできる画期的な装置であり、この数年目覚ましい成果を上げている。

国内では PF の物性研アンジュレータビームライン (BL19A) においてこれまで 100 kV Mott 型スピン検出器、25 kV Mott 型小型スピン検出器、Spin-LEED (SPLEED) 型スピン検出器などが立ち上げられ、スピン分解光電子分光法を用いた表面・薄膜磁性研究などが展開されてきた。しかしながらこれまでの Mott 型検出器や SPLEED 型などの電子のスピン軌道相互作用を利用したスピン検出器は、その検出効率が悪くスピン分解光電子分光実験は非常に時間のかかる実験であった。そのため高いエネルギー分解能や角度分解能での実験は困難であった。しかし上述の COPHEE 装置などのように第三世代 VUV-SX 光源に取り付けられた装置では光源の高い輝度を利用することにより検出効率の悪い Mott 型検出器を用いているものの、エネルギー分解能 100 meV 以下、角度分解能 1 度以下の測定が可能になってきている。残念ながら国内には VUV-SX の第三世代光源は存在せず、放射光でスピン分解光電子分光が出来る唯一のビームラインである BL19A では分光器やアンジュレータの老朽化により国際的な競争力が落ちてきているのが現状である。

我々はこの現状を打破するため高効率のスピン分解光電子分光装置の開発をこれまで進めてきた。これは低速電子の強磁性体薄膜によるスピン依存反射を利用する VLEED (Very Low Energy Electron Diffraction) 型のスピン検出器を用いたもので、これまでの百倍近い検出効率を実現し、その結果エネルギー分解能 30 meV, 角度分解能 0.7 度でスピン分解光電子分光実験が行えるようになった。しかしこの高いパフォーマンスを 100% 生かすためには光源の更新が必要で新 BL-19 の実現が強く望まれる。一方装置の改造により VLEED 型スピン検出器による 3 次元スピン解析計画、広島大学の HiSOR において VLEED 型スピン検出器と最新の SCIENTA-R4000 を組み合わせた高エネルギーおよび角度分解能、ハイスループットスピン分解光電子分光装置の開発を現在進めている。これらが実現することにより COPHEE machine より密度の濃い (Strong な) コーヒー (データ) が抽出できる、ESPRESSO (Extreme SPin REsolved SpectroScOpy) machine が稼働し、スピン分解光電子分光実験の新たな展開を押し進めていくことができると期待している。

# 対称性に起因する特異な Rashba 効果

坂本一之

千葉大学大学院融合科学研究科

kazuyuki\_sakamoto@faculty.chiba-u.jp

物質のサイズをナノメートルスケールまで小さくすると、固体の周期構造は三次元から一・二次元などの低次元周期構造へと変わる。このような低次元構造体は、新奇物性が発現する可能性を秘めており、興味深い研究対象である。二次元構造体で観測される Rashba 効果 [1] と呼ばれ、非磁性体においてもスピン分裂電子バンドが観測される現象もそのような低次元物性の 1 つである。貴金属や V 族表面で観測された Rashba 効果によるスピン分裂電子バンドは最近、軽元素基板に重元素を吸着させた系で大きくなることが報告された。これらの報告における Rashba 効果は理想的な二次元自由電子のものと同様、波数空間で時間反転のある対称点の周りでスピン分裂バンドの対を示し、等エネルギー面は渦状のスピン構造を示し、スピン偏極ベクトルは表面平行方向である。本講演では、重元素を吸着させた Si 表面において、これまでちゃんと考慮されてなかった表面の対称性が特異な Rashba 効果を引き起こすことを報告する。K 点の対称性が  $C_3$  である Tl/Si (111) ではスピン偏極ベクトルが表面垂直方向へ急に立ち上がり [3]、 $C_{3v}$  対称性を有する Bi/Si (111) では時間反転がないにもかかわらず Rashba 分裂があることなど [4]、表面構造の対称性に依存した特異な Rashba 効果が観測された。時間反転が Rashba 効果の必要条件でないことを示している、これまでどのような二・三次元系で報告されたことがないこれら新奇の量子現象は、角度・スピン分解光電子分光と第一原理計算によって研究された。

[1] Y.A. Bychkov and E.I. Rashba, JETP Lett. **39**, 78 (1984).

[2] C. R. Ast *et al.*, Phys. Rev. Lett. **98**, 186807 (2007).

[3] K. Sakamoto *et al.*, Phys. Rev. Lett. **102**, 096805 (2009).

[4] K. Sakamoto *et al.*, Phys. Rev. Lett. **103**, 156801 (2009).

# Bi および Pb 吸着 Ge(111) 表面の Rashba 型スピン分裂

京大院理 八田 振一郎

重元素を含む表面で生じる大きなスピン分裂が近年高い関心を集めている。注目される理由の一つにこのスピン分裂の源である Rashba 型スピン軌道相互作用がスピントロニクスにおいて重要な役割を担うと予想されていることがある。我々のグループでは半導体表面のスピン偏極した表面状態を介した伝導現象に関心をもち、効率的な観測が期待できる表面系の探索を行ってきた。その最近の成果について紹介する。

Pb/Ge(111) 表面には 2 種類の  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  構造が存在する。このうち高被覆率の構造 ( $\beta$  相、4/3ML) の ARPES 実験を行った。以前にもこの表面が金属的な表面状態をもつことは報告されていたが[1]、我々は高分解能の ARPES 測定によりこの表面状態が二本に分裂していることを見出した。分裂幅はフェルミ準位で約 200 meV であり、 $\Gamma$  点からの距離に比例するように拡大していた。広島大学放射光科学研究センターにおいて行ったスピン分解 ARPES により、これらの状態が Rashba 分裂した、それぞれスピン偏極した状態であることが確認された。半導体表面の金属的な状態における Rashba 分裂が実験的にスピンの配向も含めて確認されたのはこれが初めてである。なお、この表面状態は二次元自由電子的な分散を示し、その有効質量はかなり小さい ( $m^* \sim 0.03m_0$ )。このことから、この表面状態が表面電気伝導に大きく寄与することが予想される。

これまで Ge(111) 基板上で大きな Rashba 分裂を示す状態は Pb に並ぶ重い p ブロック元素、Tl や Bi を吸着させた表面についても報告してきた。これらの状態はすべて吸着原子の 6p 軌道を主成分としていた。このような状態に大きなラシュバ分裂が生じる理由は、表面における対称性の破れによって電子密度に面直方向の非対称が生じ、その結果核近傍の強い静電ポテンシャル (の勾配) が反映されたスピン軌道相互作用が生じたためと定性的に理解できる[2]。我々は Bi/Ge(111)  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  表面についてスピン分解 ARPES を行い、 $\Gamma$  点近傍、価電子帯トップ近いギャップ中にスピン偏極した状態を見出した。これは ARPES 測定でも表面状態として観測されていた状態である。この状態が表面第 4~10 層というサブサーフェイスに局在した状態であることが第一原理計算から分かった。興味深い点はこの状態において Bi の 6p 電子の寄与がほとんどないことである。つまり、表面における構造的な非対称によってスピン偏極状態がギャップ中、しかもフェルミ準位の近くに生じていることである。このことはさらに、吸着原子種が必ずしも重元素なくても、スピン偏極した状態が形成されうるということを示唆している。サブサーフェイスに局在した電子状態の Rashba 分裂はこれまで報告されていない。バルク射影域に近い状態であるため、通常の ARPES では詳細な解析の対象とならなかった可能性がある。このような状態について、スピン分解 ARPES が非常に強力な実験手法であることは間違いない。

## Referenaces

[1] H. Morikawa et al., Phys. Rev. B 77, 193310 (2008).

[2] M. Nagano et al., J. Phys.: Condens. Matter 21, 064239 (2009).

## Si 表面上In 原子鎖への電子ドーピングの効果

守川 春雲, Han Woong Yeom

*Institute of Physics and Applied Physics, and Center for Atomic Wires and Layers, Yonsei University,  
Seoul 120-749, Korea*

低次元電子系の基底状態に関する研究は、例えば有機金属系や高温超伝導体の研究で見られるように、凝縮系物理研究の中で重要な位置を占めている。低次元電子系の基底状態はフェルミ準位付近の電子状態の情報に大きく依存するため、キャリアドーピング等の外部摂動によってコントロールすることが出来る。近年、固体表面上に形成される原子鎖や原子レイヤーは、従来の擬低次元3次元結晶系とは異なる新奇の低次元電子系として注目を集めている。実際、このような系では興味深い相転移や基底状態が発見されている[1]。これらの系を用いてその基底状態をコントロールし、新たな物理を見いだすことは極めて興味深い。ところが、原子鎖へのキャリアドーピングの報告は極めて少ない[2]。

本研究においては、固体表面上の原子鎖のプロトタイプの一つであるSi(111)-4 × 1-In系を対象に電子ドーピングがその基底状態に与える影響を調べた。この原子鎖はSi(111)表面の表面第一層にInの4列の原子鎖がSiのジグザグ鎖で挟まれた構造を取る。室温における電子状態は3つの1次元的な金属バンドで特徴付けられる。そのうち1つはほぼ半占有で直線的なフェルミ面を有し、それ故、極めて良いフェルミ面ネスティングの条件を満たす。また、そのネスティングベクトルの周期は格子の周期に整合な2倍周期である。この系は125-130 K程度の低温において鎖方向へ2倍の周期を持つようになり（この状態を8 × 2構造と呼ぶ）、それと同時に金属バンドは折りたたまれ絶縁体的に転移する[3]。以上の実験結果からこの相転移はパイエルズ転移であり、8 × 2構造は電荷密度波状態であると考えられた。一方でこの解釈は、相転移に伴う格子変位の大きさ及び室温構造における格子振動の大きさを予測する理論グループからは疑問を持たれている[4]。

我々は、この系のバンドを占有する電子数はアルカリ金属(Na)蒸着により系統的にコントロール出来ることを見いだした。Naは表面に原子状吸着し、系全体に電子をドープする。ドーピングによって整合ネスティング条件が崩れると上記の金属絶縁体転移は大きく抑圧される。このことは、系の電子状態が相転移に強く相関すること、とりわけ、フェルミ面ネスティングの条件が相転移に大きく関与することを意味する。その一方で、吸着Naはその周りに局所的に8 × 2構造とは異なる周期構造（ここでは4 × 2構造と呼ぶ）を作る。この構造は金属的であるが4 × 1構造とは異なり、相転移を起こさない。即ち、Naドーパントは、系全体に及ぼす影響と局所的な影響の2つの異なる役割を果たす。Na周りの局所4 × 2構造が相転移を起こさない事実は、ドーパント周りでは系のエネルギーバランスが壊れ、4 × 2構造が局所的な基底状態となっていることを示唆する。

[1] H.W. Yeom *et al.*, Phys. Rev. Lett. **82**, 4898(1999), J.R. Ahn *et al.*, Phys. Rev. Lett. **91**, 196403 (2003), J.R. Ahn *et al.*,

Phys. Rev. Lett. **95**, 196402 (2005).

[2] W.H. Choi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **100**, 126801 (2008).

[3] J. R. Ahn *et al.*, Phys. Rev. Lett. **93**, 106401 (2004).

[4] J.-H. Cho *et al.*, Phys. Rev. B **64**, 235302 (2002), C. Gonzalez *et al.*, Phys. Rev. Lett. **96**, 136101 (2006).

# 半導体表面に形成した表面構造の歪による電子状態の変化

横浜市立大学大学院 生命ナノシステム科学研究科<sup>1</sup>国際総合科学研究科<sup>2</sup>

重田諭吉<sup>1</sup>、望月出海<sup>2</sup>、根岸良太<sup>2</sup>

金属吸着表面の電子状態が格子歪を導入することで、どのような影響を受けるかに注目して研究を行った。

図 1 は、(a) Si(111)-Ag, (b) Si/Ge(111)-Ag, (c) Ge(111)-Ag, (d) Ge/Si(111)-Ag 表面の STM 像を示す。ヘテロエピタキシャル成長させた膜厚は、全て  $\theta_{\text{Si}} = \theta_{\text{Ge}} = 1 \text{ BL}$  である。全ての表面で  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -R30° 周期性を持つ表面構造が確認され、Honeycomb Chained Trimer (HCT) 構造が形成していることが分る。したがって、歪みによる電子状態の変化が比較可能であることが分かる。

これらの  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag 表面の ARUPS 測定を行った。測定された光電子スペクトル(EDC: Energy Distribution Curve)の例として、図 2(a)と 2(b)には、図 1(a)と 1(d)の表面から得られた EDC を示す。スペクトルは、 $[1\bar{1}0]$  方向に沿って光電子放出角 28 ~ 38° であり、逆格子空間における  $\Gamma_1$  点近傍の領域に対応する。EDC は、HCT 構造の特徴である、 $S_1 \sim S_4$  状態が観測されている。各 EDC に対してピークフィッティングを行い、5つの表面状態  $S_1 \sim S_4, S'$  に対応するピークを分離し、それぞれのピーク ( $S_1 \sim S_4, S'$ ) の位置を印で示す。この電子状態の分散からも表面に HCT 構造が形成されたことが判断できる。また、図 1 に示した全ての表面で実験を行い、同様の特徴が現れることを確認した[1,2]。

図 2 の EDC を詳細に比較すると、図 2(b)の分散は、2(a)に比較して全体的に低放出角側(グラフ下方側)にシフトしていることが分かる。これは、図 1(d)の Ge/Si(111)-Ag 表面の逆格子間隔が、1(a)の Si(111)-Ag 表面と狭くなっていることを示し、実空間においては、格子間隔が広がっていることを表わしている。この分散のシフトから、歪を伴う表面の平均的な格子間隔の変化を見積った。その結果、圧縮歪みでは  $S_1$  状態の分散が急に(有効質量は軽く)なり、延伸歪みでは  $S_1$  状態の分散が緩やかに(有効質量は重く)なった[2]。この結果は、Ag-5p 軌道の重なりの違いで定性的に説明できる。

[1] I. Mochizuki, R. Negishi and Y. Shigeta, *J. Appl. Phys.* **106**, 013709 (2009).

[2] I. Mochizuki, R. Negishi and Y. Shigeta, *J. Appl. Phys.* in submission.

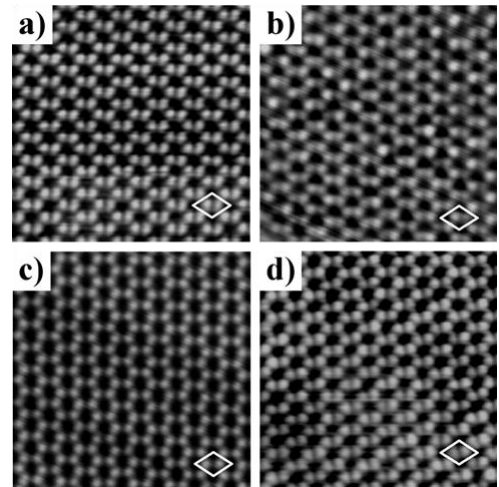


図 1 (a) Si(111)-Ag, (b) Si/Ge(111)-Ag, (c) Ge(111)-Ag, (d) Ge/Si(111)-Ag 表面上の  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag 構造。(7×7nm<sup>2</sup>)

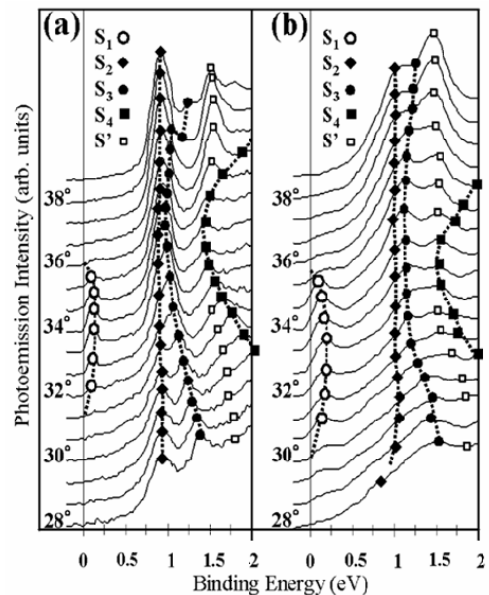


図 2 (a) Si(111)-Ag 表面、(b) Ge(111)-Ag 表面の EDC。

# Au/Ge 表面の電子状態

東京大学物性研究所 中辻 寛

金属を蒸着した半導体基板上に形成される 1 次元構造は、1 次元金属系特有の電子状態の観点から、あるいは他の物質の蒸着による 1 次元構造のテンプレートとしての興味から、近年特に Si 基板上において活発に研究が行われている。Ge(001)表面においても Pt あるいは Au の蒸着により、ナノワイヤ構造が形成されることが知られており、Au の場合には理想的な 1 次元金属系が実現しているとする報告もなされている[1]。本研究では、角度分解光電子分光(ARPES)による詳細な電子バンド構造測定により、本系が異方的 2 次元金属状態を有することを明らかにした。また、走査トンネル顕微鏡(STM)観察と表面内殻準位シフト(SCLS)の測定により、表面構造の知見を得た。

光電子分光実験は、実験室光源及び BL18A にて 17 – 115 eV の光を用い、光電子アナライザとして SES100 を用いた。18A においては  $k_x$  方向だけでなく  $k_y$  方向のバンド分散を簡単に得るため、アナライザを 90° 回転した測定も行った。試料は 670 K に保った Ge(001) 基板に Au を 1 層程度蒸着して作成した。STM 観察からは、ナノワイヤに平行・垂直両方向に 8 倍周期の構造が確認された。

価電子帯バンド分散およびフェルミ面の測定から、ナノワイヤに平行又は垂直方向の 8 倍周期を反映した金属バンドが確認され、このバンドのフェルミ面形状から、本系は異方的な 2 次元金属バンドをもつことがわかった。異方性はナノワイヤ構造を反映していると考えられる[2]。入射偏光依存性から、このバンドは s 又は  $p_z$  的な対称性を持つこともわかった。STM ではナノワイヤ間に深い溝が観察されており、過去の文献でも(111)マイクロファセット構造モデルが提案されている[3]。Au 4f 及び Ge 3d の SCLS 測定からは、Au に 2 種類の荷電状態があること、モデルで提案されている Ge ダイマー列は存在しないことが明らかになった。

この他、Ge(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Au 表面の電子状態測定を行った。この系は 2 枚のフェルミ面を持つ 2 次元金属系であることがわかった。またそのうち一方は波数方向に分裂しており、Rashba 効果による分裂であるかどうか、今後 BL19A におけるスピン分解光電子分光測定が待たれることを指摘した。

本研究は、東大物性研・小森研究室の新倉涼太、柴田祐樹、山田正理、飯盛拓嗣、富松宏太、小森文夫 各氏との共同研究である。また、軌道放射物性研究施設の皆様に大変お世話になりましたので、この場を借りて御礼申し上げます。

[1] Schäfer et al., PRL101 (2008) 236802.

[2] K. Nakatsuji et al., Phys. Rev. B 80 (2009) 081406(R).

[3] A. Van Houselt et al., PRB78 (2008) 233410.

# チタン薄膜直下におけるシリコン酸化促進反応の解析

横国大工 大野 真也

SiO<sub>2</sub>膜に変わる high-*k* 絶縁膜材料として IV 族元素の酸化物、すなわち HfO<sub>2</sub>, ZrO<sub>2</sub>, TiO<sub>2</sub> は誘電率が高いことから多くの研究がなされてきた[1]。high-*k* 膜形成において問題となる移動度の低下は、Si 基板と high-*k* 絶縁膜との間に緩衝層を形成することにより緩和できることが報告されている[2]。従って、high-*k* 絶縁膜とシリコン基板の界面に形成される SiO<sub>2</sub> 膜の構造制御は重要な課題である。

SiO<sub>2</sub>/Si 界面では、バルクと同様のバンドギャップを持つ SiO<sub>2</sub> 層に移り変わるまでに最低でも二原子層程度の遷移層が存在することが断面 EELS の結果から示されている[3]。理論的には、次近接酸素の個数とバンドギャップとの相関が示されている[4]。次近接酸素の個数は最大で六個であるが、その様な酸素原子の存在はシリコンの側から見ると四個の酸素原子に取り囲まれた酸化状態 (Si<sup>4+</sup>) の形成を意味する。

本研究では、数原子層程度のチタン薄膜を蒸着させた Si(001) 表面に酸素を暴露し、シリコン基板の酸化状態がどのように変化するのかを詳しく調べた。Fig. 1 に室温においてチタンを吸着させ、その後酸素暴露(750 L)を行った場合に得ら

れた Si 2p スペクトルを示す。この結果から、酸素暴露後に基板のシリコンが酸化され高酸化状態(Si<sup>3+</sup>, Si<sup>4+</sup>)が支配的に形成されることが分かった。酸素のみを暴露した場合、各酸化状態(Si<sup>+</sup>, Si<sup>2+</sup>, Si<sup>3+</sup>, Si<sup>4+</sup>)と化学シフト量との相関は確立している[5]。Gaussian03 を用いて、Ti/Si(001)界面に現れる安定な酸素吸着サイトや、化学シフトとマリケン電荷との比例関係[6]について検討した。

我々は、チタン膜厚、酸素暴露量とシリコン基板の酸化状態との相関をさらに詳しく調べることにより、高酸化状態の形成メカニズムの詳細を明らかにしたいと考えている。

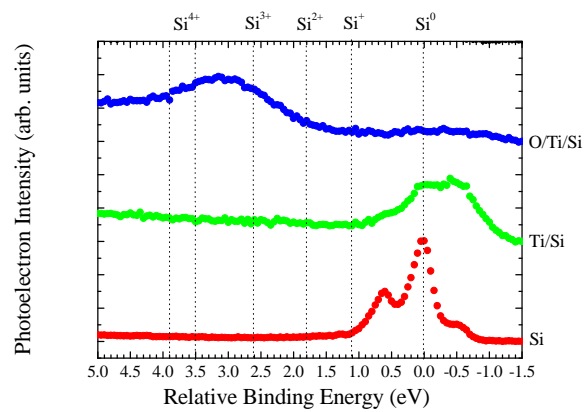


Fig. 1 Si(001)清浄表面、チタン吸着 Si(001)表面、チタン酸素共吸着 Si(001)表面の Si 2p スペクトル

## 参考文献

- [1] G.D. Wilk *et al.*, J. Appl. Phys. **89** (2001) 5243.
- [2] M. Hiratani *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **41** (2002) 4521.
- [3] D.A. Muller *et al.*, Nature **399** (1999) 758.
- [4] J.B. Neaton *et al.*, Phys. Rev. Lett. **85** (2000) 1298.
- [5] F.J. Himpsel *et al.*, Phys. Rev. B **38** (1988) 6084.
- [6] L. Meda *et al.*, Surf. Interface Anal. **29** (2000) 851.