

シリセン/ZrB₂/Si(111)表面におけるNOの吸着と熱反応過程

吉信淳¹, 向井孝三¹, 上田博昭¹, 吉本真也¹, 清水皇¹, 小坂谷貴典¹, 則武宏幸¹,

Chi-Cheng Lee¹, 尾崎泰助¹, Antoine Fleurence², 高村由起子²

東大物性研¹, 北陸先端大²

シリセン/ZrB₂/Si(111)表面におけるNOの吸着と熱反応過程を高分解能X線光電子分光 (XPS) および密度汎関数法による第一原理計算で研究した。XPSの結果より, NO 分子は, 室温のシリセン表面で解離吸着する。酸素原子はSi とSiの間に結合すると考えられる (Si-O-Si)。窒素原子の状態は2種類観測された。一つは, シリセンのSi原子と置換し, N(-Si)₃のように3配位で結合したものの。もう一つは, Si とSiの間に挿入されたもの (Si-N-Si), あるいはSiと置換しピリジンの窒素のように端で2配位になっているものである。曝露量を増やすと, シリセン固有のスペクトル構造はなくなり, 3次元的なSiの酸窒化層が生成されたと考えられる。この表面を加熱すると900KでO1sのXPSピークが減少し, SiO種として表面から脱離したと考えられる。一方, N1sは1053K加熱後も観測された。シリセン固有のSi2pスペクトルが復活し, シリセンおよびSiN種とBN種が表面化合物として生成していると考えられる。