

全反射高速陽電子回折(TRHEPD)法とデータ駆動科学による Pb/Si(111)表面超構造の構造解析

○*濱田雅史¹, 辻川夕貴¹, 望月出海², 星健夫³, 兵頭俊夫², 高山あかり¹

¹早稲田大学先進理工学研究科, ²KEK 物質構造研究所低速陽電子実験施設, ³鳥取大工学研究科

Structural analysis of Pb/Si(111) surface superstructure by total reflection high energy positron diffraction (TRHEPD) and data driven science

○*Masashi Hamada¹, Yuki Tujikawa¹, Izumi Mochizuki²,
Takeo Hoshi³, Toshio Hyodo² and Akari Takayama¹

¹Graduated School of Advanced Science and Engineering, Waseda University

²Low Speed Positron Experimental Facility, Material Structure Laboratory, KEK

³Graduate School of Engineering, Tottori University

Si(111)基板にPbを蒸着した系では、Pbの蒸着量によって様々な表面超構造が存在することが知られている[1]。そのうち、Pbの蒸着量が1/3 MLと1/6 MLの構造は、低速電子線回折(LEED)法ではどちらも $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 周期として観測されるが[2]、モザイク状の構造を示す1/6 MLの構造においては、理論計算により $2\sqrt{3}\times 2\sqrt{3}$ 周期を持つことが示唆されている[1]。しかし、これら2つの構造は、LEEDの回折パターンのみからは2つの構造の判別は難しく、また、モザイク状の構造解析の困難さから、詳細な原子構造の決定に至っていない。

本研究では、Pb/Si(111)- $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 構造について、全反射高速陽電子回折(TRHEPD)法を用いて、層間距離および原子密度をパラメータとして構造解析を行い、蒸着量の同定と構造決定を行った。Fig.1に層間距離と原子密度のみを反映した条件で測定した(00)反射スポットの視射角依存性(ロッキング曲線)を示す(青丸)。先行研究で提唱されている1/3 MLと1/6 ML両方の構造モデル[1]と実験結果を比較検討するため、各原子層の層間距離を変数としてデータ駆動科学を取り入れた解析ソフト[3]を用いて構造探索を行った。その結果、従来の構造モデルでは、両者とも実験結果を再現せず(緑、オレンジ点線)、Fig.2に示す1/6 MLの構造モデルが、最も実験値を再現するロッキング曲線(赤線)を示すことがわかった。また、1/3 MLの構造を初期値とし、層間距離とPbの原子密度を変数として解析を行った結果、Fig.2の層間距離かつ表面におけるPbの原子密度が1/6 MLに対応する値で実験値を最も再現した(黒線)。このことから、今回作製した試料は1/6

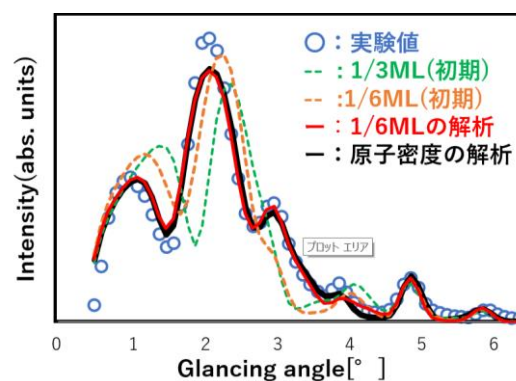


Fig. 1. ロッキング曲線の実験値と解析結果

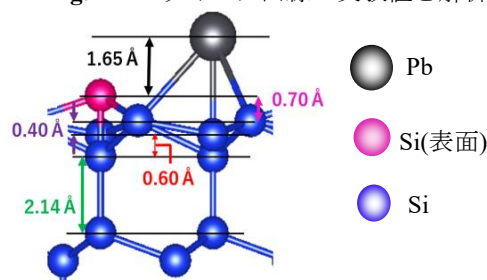


Fig. 2. 本研究で提案する1/6 ML-モザイク相の構造

MLであると結論づけた。また、本手法によって、これまで難しいとされてきたモザイク層の構造についても情報の得ることができると考えられる。

講演では、実験及び詳細な構造解析結果を示し、構造モデルの妥当性についても議論する。

- 1) T. L. Chan, *et al.*, Phys. Rev. B, **68**, 045410 (2003).
- 2) E. Ganz, *et al.*, Surf. Sci, **257**, 259 (1991).
- 3) K. Tanaka, *et al.*, Acta. Phys. Pol. A **137**, 188 (2020).