

研究会資料

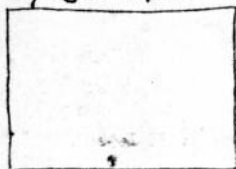
RHEED - 基礎的理論とその応用例

1986, 10, 22

芝原 健太郎

—初級—

アモルファス



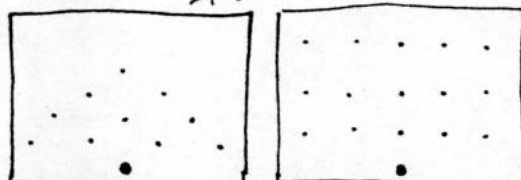
ハロ・パターン

多結晶



同心円のつくり

単結晶



規則定(くまんでい)

スポット スポット

点が並びきようなもの

—中級—

名称 Reflective High Energy Electron Diffraction
(高速電子線回折)

RED, HEED とも呼ぶ。(LEED, MEED といふものもある)

Low Medium(?)

Energy
約10~100 eV

定義は不明確

原理

「M.L. de Broglieが」運動している粒子はその速度と波長が運動している粒子の速さと質量とによって支配される様な一群の波動として働く」という新しい物理学理論即ちいわゆる物質波動論を発表し次いでDavissonとGermerは金属の表面に電子線を投射して、それから散乱した電子線の強度分布を電氣的に調べた。その後(1928)G.P. Thomsonは金属の薄膜による電子線の回折写真撮ること成功しde Broglieの理論の正しいことが実験的に証明せられた。そして同時に此の電子線の回折写真と金属薄膜の結晶構造との間に密接なる関係の存在することが実証せられた。モデル。

しばらくして電子線回折現象がX-線と相並んで物質構造の研究に役立つことが判ってきたのであるがそれ以来その日未だ浅いにもかかわらずこの方面のあらゆる部門にわたって有力なる武器として利用せられて多くの成果がもたらされている。物質構造の研究方法としてはX-線と電子線とは相互に補助的な役目をなすけれども電子線のX-線に対する有利性は物質の表面又はその薄膜の研究に於て特に顕著である。それは電子線の物質に対する透過性がX線とは反対に極度に小さい点である。即ち電子が厚さ 10^{-6} cm 以上の物質と非弾性的衝突をなすことなく通過することはすでに非常に困難である。この性質のために電子線は物質表面の研究に最も有効でありここに述べようとする金属酸化皮膜の研究に関しても最も適合した方法といわねばならない。

「電子線回折による金属酸化皮膜の研究」 緒言より引用

昭和16年(1941) 香川辰夫

1) 電子線の波長

$$p = mv = m_0 v / \sqrt{1 - (v/c)^2} \quad (p: \text{運動量}, m: \text{電子の運動質量}, m_0: \text{電子の静止質量})$$

$$eE = mc^2 - m_0 c^2 \quad (E: \text{加速電圧})$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \sqrt{\frac{150.4}{E}} (1 + 9.788 \times 10^{-7} E)^{-1/2} [\text{\AA}] \quad (E \text{ は } V)$$

電子線波長は
@ 100分の1
ぐらい

$$10 \text{ KeV}: 0.122 \text{ \AA}$$

$$20 \text{ KeV}: 0.086 \text{ \AA}$$

$$100 \text{ KeV}: 0.037 \text{ \AA}$$

$$80 \text{ KeV}: 0.042 \text{ \AA}$$

$$(\text{参考: Cu } K_{\alpha 1}: 1.542 \text{ \AA})$$

$$Si: a_0 = 5.43 \text{ \AA}, S: C: a_0 = 3.57 \text{ \AA}, GaAs: a_0 = 5.65 \text{ \AA}$$

(2) フラッグの法則

「入射波が結晶内の平行な原子面により鏡のように反射される」

弾性散乱を考へる。(波長は変化しない)

異なる面から反射された波の行路差が波長 λ の整数倍になり時、干渉して強くなる。

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad \text{Bragg law}$$

仮定が単純なので回折現象一般に用いることができる。
X線回折ならば上式と構造因子(後述)さえ理解していればほとんど用が足りる。

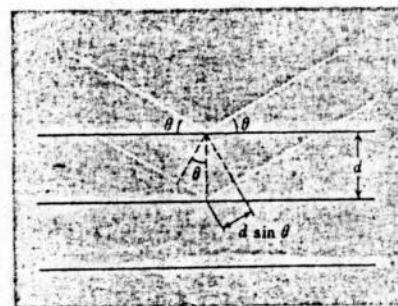


図 2-3 フラッグの式 $2d \sin \theta = n\lambda$ の導出。
ここに d は平行な原子面の面間隔。 $2n\pi$ は、つぎつぎの面からの反射波間の位相差である。反射面は試料の外形上の表面とは関係がない。

(3) フーリエ解析と逆格子

結晶の性質の大部分は電子密度のフーリエ成分に依存づけられることができる。

一次元では

電場分布

$\rho(x)$ はフーリエ級数を用いて上式のように表せる。

$$\rho(x) = \sum_p \rho_p \exp(i2\pi p x/a) \quad (a: \text{格子定数}, p: \text{整数})$$

又点における電子密度

→ 波束、波の集束と記す

三次元では

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} \rho_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}} \quad \text{--- (A)}$$

を満たすベクトル $\mathbf{g}$ が存在している。

(上式は全ての格子点に適用 $\mathbf{r} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$ に対して)

成り立たない)

a, b, c は結晶格子の基本並進ベクトルであり時
逆格子の軸ベクトルは次のようにする

$$A = 2\pi \frac{b \times c}{a \cdot b \times c}, \quad B = 2\pi \frac{c \times a}{a \cdot b \times c}, \quad C = 2\pi \frac{a \times b}{a \cdot b \times c} \quad \text{--- (B)}$$

$$(A \cdot a = 2\pi, B \cdot b = 2\pi, C \cdot c = 2\pi \text{ 他の組は } 0 \text{ (ゼロ)})$$

$$G = hA + kB + lC \quad \text{--- (C)}$$

(h, k, l 整数)

G は逆格子ベクトルといふ。

- 全ての結晶は結晶格子と逆格子を有している
- 結晶の回折パターンは逆格子の地図である
- 結晶を回転させると結晶格子も逆格子も共に回転する。
- 結晶格子内のベクトルは [長さ] の次元を持つ
逆格子内のベクトルは [長さ⁻¹] の次元を持つ
- 結晶格子 → 実空間, 逆格子 → フーリエ空間

①式で定義したベクトル G は ④式に用いている G である

(G は $\pi = uA + vB + wC$ に対して、電子密度のフーリエ級数は不変であるといふ)
任意の

$$\text{特性を満たすから} \rightarrow \exp(iG \cdot \pi) = 1$$

結晶格子で周期的な関数のフーリエ解析を行う時 $G = hA + kB + lC$ で定義された逆格子点でのみ成分 $\exp(iG \cdot r)$ が現れる。

(4) 回折の条件

図 2.13 のように片が離れている体積素片による散乱を考える。点 O と点 P の入射波長の (長は入射波, 長は散乱波の波数ベクトル) 経路差は $r \sin \theta$ である。
 $\lambda \cdot k = |\lambda| \cdot |k| \cos(\frac{\pi}{2} - \theta) = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot r \cdot \sin \theta$ 故 長 k は位相 θ の差に等しい。
結局片が離れている体積素片からの散乱波間の位相差による因子は

$$\exp(i(k - k') \cdot r)$$

体積素片

以下

$$\text{②. } |k| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

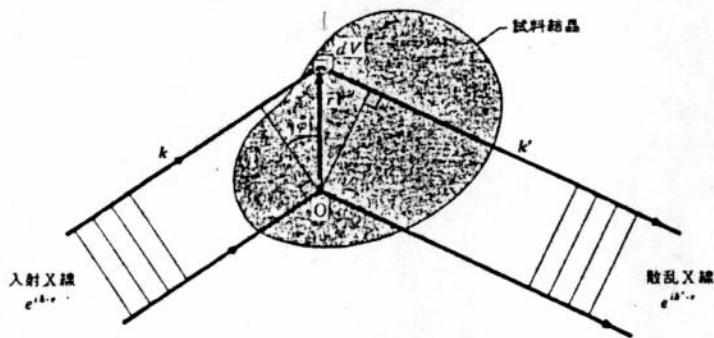
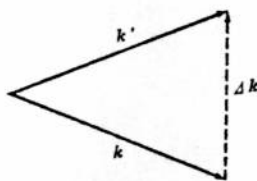


図 2-13 点 O と点 r における入射波 k の行路差は $r \sin \phi$ であり、位相角の差は $(2\pi r \sin \phi)/\lambda$ であって $k \cdot r$ に等しい。回折波については位相角の差は $-k' \cdot r$ である。位相角の差の合計は $(k - k') \cdot r$ であって、 r にある dV による散乱波は、原点 O にある体積素片による散乱波に対して位相因子 $\exp[i(k - k') \cdot r]$ を持つ。

図 2-14 $k + \Delta k = k'$ を満足する散乱ベクトル Δk の定義。弾性散乱においては、波動ベクトルの大きさは $k' = k$ を満足する。さらに、周期的な格子によるブラッグ散乱においては、 Δk はどれもある逆格子ベクトル G に等しくなければならない。



体積素片からの散乱波の振幅は、その位置の電子密度に比例する。 k' 方向への散乱波の合成振幅は $n(r)dV$ と位相因子 $\exp[i(k - k') \cdot r]$ との積の結晶全体にわたる積分値に比例する。換言すれば、散乱される電磁波の電気ベクトルあるいは磁気ベクトルの振幅は量 a を定義する下記の積分に比例する。この a を散乱振幅 (scattering amplitude) と呼ぶ。

$$a = \int_V dV n(r) \exp[i(k - k') \cdot r] = \int_V dV n(r) \exp(-i \Delta k \cdot r) \quad (2-17)$$

ここに

$$k + \Delta k = k' \quad \Delta k = k' - k \quad (2-18)$$

である。 Δk は散乱における波動ベクトルの変化を表わし、散乱ベクトル (scattering vector) (図 2-14) といわれる。 k に Δk を加えると散乱波の波動ベクトル k' が得られる。

$n(r)$ のフーリエ展開を (2-17) に代入して

$$a = \sum_G \int_V dV n_G \exp[i(G - \Delta k) \cdot r] \quad (2-19)$$

が得られる。散乱波のベクトル Δk が逆格子ベクトル G に等しいとき、指数関数の引き数は 0 となり、 $a = V n_G$ となる。 Δk がどの逆格子ベクトルとも差が相当大きいとき、 a の大きさを無視できることを示すのは簡単な演習問題 (問題 6) である。

弾性散乱において、フォtonsのエネルギー $\hbar\omega$ は保存されるから、散乱線の振動数 $\omega' = ck'$ は入射線の振動 $\omega = ck$ に等しい。それゆえ k と k' の大きさは等しく、 $k^2 = k'^2$ である。上述の結果 $\Delta k = G$ あるいは $k + G = k'$ から、回折条件は $(k + G)^2 = k^2$ 、すなわち

$$2k \cdot G + G^2 = 0 \quad (2-20)$$

となる。これが周期的な格子における弾性散乱の理論の最も重要な結果である。まったく同じ結果が、結晶における電子のエネルギーのバンド構造の理論に現われる。もし G が逆格子ベクトルであれば、 $-G$ も逆格子ベクトルであることに注意すると、(2-20) を $2k \cdot G = G^2$ と書くことができる。

さて、(2-20) はブラッグの法則のもう 1 つの表現である。問題 2 の結果から方向 $G = hA + kB + lC$ に垂直な平行格子面の面間隔 $d(hkl)$ は $d(hkl) = 2\pi/|G|$ となる。それゆえ $2k \cdot G = G^2$ の結果は

$$2(2\pi/\lambda) \sin \theta = 2\pi/d(hkl) \quad (2-21)$$

すなわち $2d(hkl) \sin \theta = \lambda$ である。ここで θ は入射線と結晶面との間の角である。 G を定義する整数 hkl は現実の結晶面の指数と等しい必要はない。 G を定義する整数は公約数 n を持っていてよいが、面指数では公約数 n は約されている。それゆえブラッグの結果

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (2-22)$$

が得られる。ここに d は指数 $h/n, k/n, l/n$ を持つ隣り合った結晶面の面間隔である。

*

$$2k \cdot G$$

$$= 2|k||G| \cos \phi$$

$$= 2 \cdot \frac{2\pi}{\lambda} G \cdot r \sin \theta \quad (\because \theta = \frac{\pi}{2} - \phi)$$

$$G = \frac{2\pi}{d(hkl)} \text{ を用いて (2-21)}$$

◎ $|k - k'|$ が逆格子 Vector G に等しいとき散乱

様相は $\Delta k = G$ が散乱の条件

問題 2.

(a) $G = hA + kB + lC$ は (hkl) 面に垂直なベクトル。

(hkl) 面の法線は $\frac{a}{h}, \frac{b}{k}, \frac{c}{l}$ の通る

hkl 面は $\mathcal{S} = \left(\frac{a}{h} - \frac{b}{k} \right) \times \left(\frac{b}{k} - \frac{c}{l} \right)$

に垂直。 $\frac{2\pi \cdot hkl}{a \cdot b \cdot c} \mathcal{S} = lC + hA + kB = G$

(b) 面間隔は $\frac{a}{h}, \frac{b}{k}, \frac{c}{l}$ の通る面と

原点の距離を求めたい。

この法線が面と垂直な面積は $|S|$

∴ 1 原点が面と垂直な面積は

$V = \frac{a \cdot b \cdot c}{hkl} \therefore d = \frac{2\pi}{|G|}$ とわかる。

$$\Delta k = k - k' = G$$

に再び注目する。

$$|k| = |k'| = \frac{2\pi}{\lambda} = \text{const} \text{ 故}$$

長さ決定する。

△kの軌跡は球を描く。

$k = k'$ は明かに上式を満足するので $G = 0$

kの先端が逆格子点上にくる点
半径 $\frac{2\pi}{\lambda}$ の球を逆格子空間で描いた。

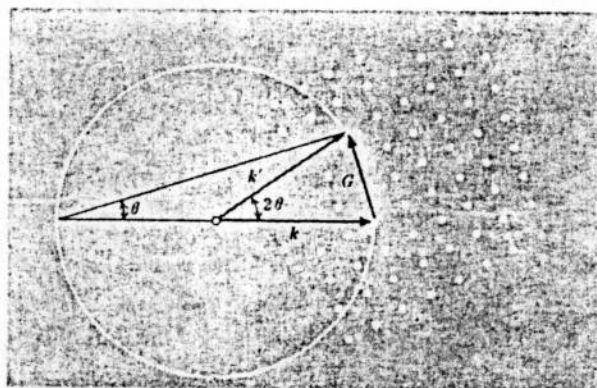


図 2-15 右側の点は結品の逆格子点を示す。ベクトル k を入射 X 線方向に引き、先にどこかの逆格子点にくるようにする。k の始点 (origin) のまわりに半径 $k = 2\pi/\lambda$ の球を描く。もしこの球が逆格子の他の点を通るならば回折線が生ずる。画かれた球は k の先の点と逆格子ベクトル G で結ばれている点を通っている。すなわち回折 X 線は $k' = k + G$ の方向に生ずる。この作図はエバルトにより提案されたものである。

エバルトの作図

時、球と交わる逆格子点 $G = hA + kB + lC$ の回折つまり、 (hkl) 面に 1 回折が生ずる。この球を (Ewald 球といふ)

(5) 構造因子

回折の条件 $\Delta k = G$ が満足されるとき、散乱振幅は (2-17) で決定され、それは N 個の単位格子を持つ結品については

$$a_G = N \int_{\text{単位格子}} dV n(r) \exp(-iG \cdot r) = N S_G \quad (2-40)$$

となる。量 S_G は構造因子 (structure factor) といわれ、単位格子の 1 つの角で $r=0$ とし、単位格子全体にわたった積分で定義される。

(2-40) で定義される構造因子は単位格子内の s 個の原子全体にわたる積分として書くことができる。すなわち

$$\begin{aligned} S_G &= \sum_j \int dV n_j(r - r_j) \exp(-iG \cdot r) \\ &= \sum_j \exp(-iG \cdot r_j) \int dV n_j(\rho) \exp(-iG \cdot \rho) \end{aligned} \quad (2-42)$$

となる。ここに $\rho = r - r_j$ である。ここで原子形状因子 (atomic form factor) (原子散乱因子) を、全空間で積分して

$$f_j = \int dV n_j(\rho) \exp(-iG \cdot \rho) \quad (2-43)$$

と定義する。この因子は大部分原子の性質で決まる。単位構造 (basis) の構造因子は

$$S_G = \sum_j f_j \exp(-iG \cdot r_j) \quad (2-44)$$

となる。

単位格子なら

$\rightarrow N \times$ (単位格子内の積分)
(組数) で求める。

n_j :

単位格子の j 番目の原子あたりの電子の電子密度関数

r_j : j 番目の原子の中心までのベクトル

◎ 単位格子内における原子の位置

この結果の通常用いられる形は、(1・3)のように $r_j = x_j a + y_j b + z_j c$ と表わし、

hkl 反射に対して

$$r_j \cdot G = (x_j a + y_j b + z_j c) \cdot (hA + kB + lC) = 2\pi(x_j h + y_j k + z_j l) \quad (2 \cdot 45)$$

となるから

$$S(hkl) = \sum_j f_j \exp[-i2\pi(x_j h + y_j k + z_j l)] \quad (2 \cdot 46)$$

の形である。構造因子は実数である必要はない。散乱強度は $S^* S$ に比例する。ここに S^* は S の共役複素数である。 S が 0 のときは空間格子としては許されている反射 G に

おいて強度が 0 になる。もし異なった単位格子を採用すると、単位構造も変わるが、物理的な散乱現象は変化してはならない。それゆえ 2 種の単位格子 1, 2 に対しては

$$S_1(\text{単位格子}) \times S_1(\text{単位構造}) = S_2(\text{単位格子}) \times S_2(\text{単位構造})$$

が成立する。

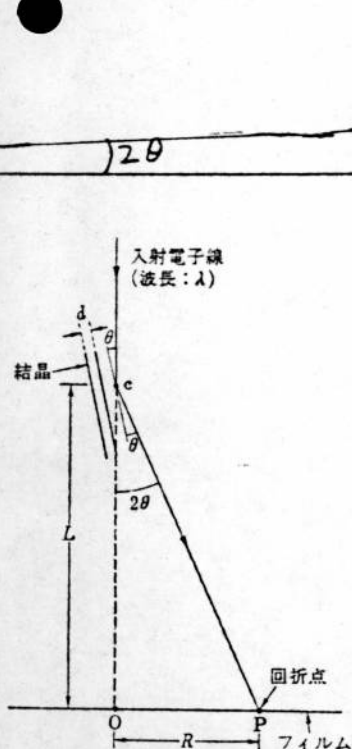
ここまでの議論は、X線でも電子線でも通用するもの。

6) 電子線回折

一おこしおこし

電子線回折においては「結晶内での入射線の減衰や多重散乱を無視した運動学的回折理論が適用できる場合が少く、むしろ動力学的回折効果の現われる場合が多い。」

回折波の強度分布等を求めるためには動力学を用いなければいけないが私は全然知りませんので今回その話はしてきません。



電子線回折では

お迷い考えているので...

電子線の波長に比べて格子定数かす、と大きいので Ewald 球は平面に近似的なことかできる。これに加えて現実の逆格子点は試料形状結晶の不完全性等により、「伸び」ているので小さな散乱角 θ に対して多数の回折を生ずる。実際の試料と電子線の関係は左図のように表わすことができる。

逆格子点(のつり)伸びている。

$$R = \frac{L\lambda}{d_{hkl}} = L \frac{\lambda}{2\pi} |G| \quad \leftarrow \text{左式で表わす位置}$$

輝点が生ずる。上式はスクリーンがフィルム上に逆格子 (Ewald 球に接する部分の) の投影が投影されることを示している。

$$\begin{aligned} \tan 2\theta &\approx 2\theta = R/L \\ 2\theta &= \lambda (\sin \theta \approx \theta) \\ d &= L/\theta \end{aligned}$$

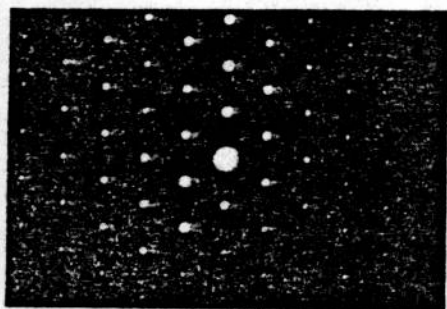


図 5-12 網目像 (MoS₂ の薄片の透過電子回折像)

透過による回折では網目像と呼ばれるパターンが生じる。



あみ目の交点に輝点が生ずる。

つまり逆格子点

結晶の形状

逆格子空間における強度分布

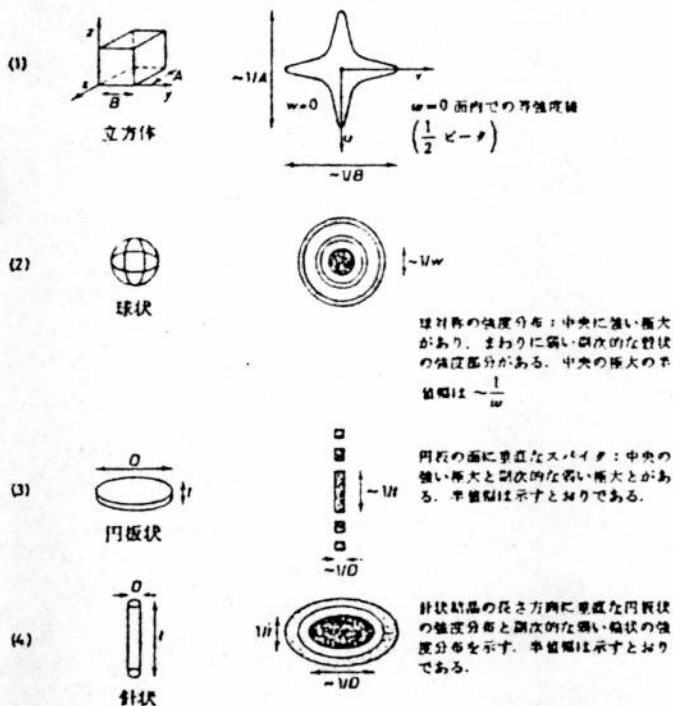


図 4-11(b) いろいろな形状の結晶における強度分布 (図解)。(1) 立方体, w, p 面 ($w=0$) における等強度線のプロット, (2) 球状, (3) 円板状, (4) 針状。

← 逆格子点の伸びについて。

様々に

実 逆

面 $\longleftrightarrow$ 垂直な線

線 $\longleftrightarrow$: 面 (逆格子 plane) $\longleftrightarrow$ 点

厚いと点に近づく

薄いと伸びる (逆格子 point)

④ 伸びる面に垂直な方向

透過, 反射の HEED は大体 (b) に相当する。

透過は薄くないと電子線が通らない。反射は試料に対する入射角が小さいので等価的に薄い試料のようになる。

この図は「透過電子顕微鏡法」といふ本がいました。この本名のデリミットは行方不明です。誰か知りませんか?

こゝで大体準備ができたので, Si (ダイヤモンド構造) と β -SiC (Zinc blende 構造の) RHEED パターンを求めてみる (よ)。

必要なのは

- 逆格子
- 構造因子
- 2重回折

です。

(多結晶では $R = \frac{L\lambda}{d_{hkl}}$ で示される同心円の集合となります。→ デバイ環)

[7] RHEED パターンを求めよ。

Si, SiC も立方晶ですが $\left\{ \begin{array}{l} |a_0| = |a_1| = |a_2| \\ a_0 \perp a_1, a_1 \perp a_2, a_2 \perp a_0 \end{array} \right.$

$$\therefore A = 2\pi \frac{b \times c}{a \cdot b \times c} = 2\pi \frac{|a_0|^2 \times \frac{a_0}{|a_0|}}{b \times c} \times \frac{1}{\frac{1}{a \times b \times c}} = 2\pi \frac{a_0}{|a_0|^2}$$

すなわち $A \parallel a_0, B \parallel a_1, C \parallel a_2$ です。



次に構造因子

ダイヤモンド構造の単位格子中には $\left. \begin{array}{l} 8 \text{ 個} \\ 4+4 \text{ 個} \end{array} \right\}$ の原子がある

Zincblende

まず Zincblende について考える。Zincblende は 2つの $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ ずれた面心立方格子からなる。

一方の面心立方は Si が居る。 $(0,0,0), (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}), (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}), (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ の位置にあり、もう一方の面心立方に属する C はこれより $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ ずれた位置にある。

$$\therefore S(hkl) = \sum_{j=1}^8 f_j \exp[-i2\pi(x_jh + y_jk + z_jl)]$$

$$= \sum_{j=1}^4 f_{Si} \exp[-i2\pi(x_jh + y_jk + z_jl)] + \sum_{j=1}^4 f_C \exp[-i2\pi(x_jh + y_jk + z_jl)] \times \exp[-i2\pi(\frac{1}{4}h + \frac{1}{4}k + \frac{1}{4}l)]$$

(原子形状因子)

$$= (f_C + f_{Si}) e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)} \{ 1 + \cos\pi(h+k) + \cos\pi(k+l) + \cos\pi(l+h) \}$$

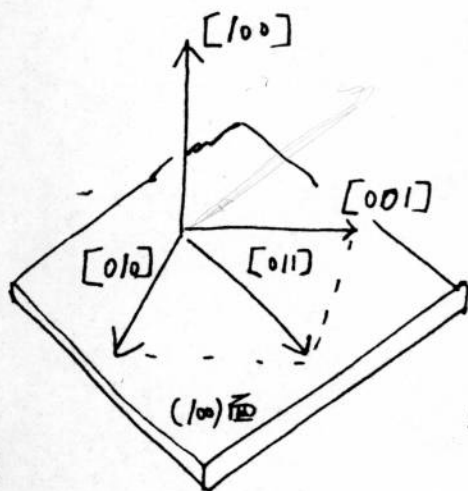
ダイヤモンド構造では $f_C = f_{Si} = f$ とすればよい。

結局 zincblende は h, k, l が奇数, 偶数 混在している時 $S(hkl) = 0$

ダイヤモンド構造ではさらに $h+k+l$ が 4の倍数で無い時 (例えば 002) に $S(hkl) = 0$ となる
偶数で 2の倍数

$\left(\begin{array}{l} \frac{1}{4} \text{ を } 1 \text{ に換えると} \\ \text{Zincblende } h, k, l \text{ が奇数, 偶数のみから成り立つ} \\ \text{ダイヤモンド構造 } h, k, l \text{ が奇数のみ} \\ \text{偶数のみで } h+k+l \text{ が 4の倍数} \end{array} \right) \text{ の時に回折が生じる}$
Schell#0.

ここではSi及びSiC(100)面の試料についてRHEEDパターンを求めてみたい。
(スポット、ストリークの議論は後述)



← (100)面と結晶方向の関係。逆格子についても同様。

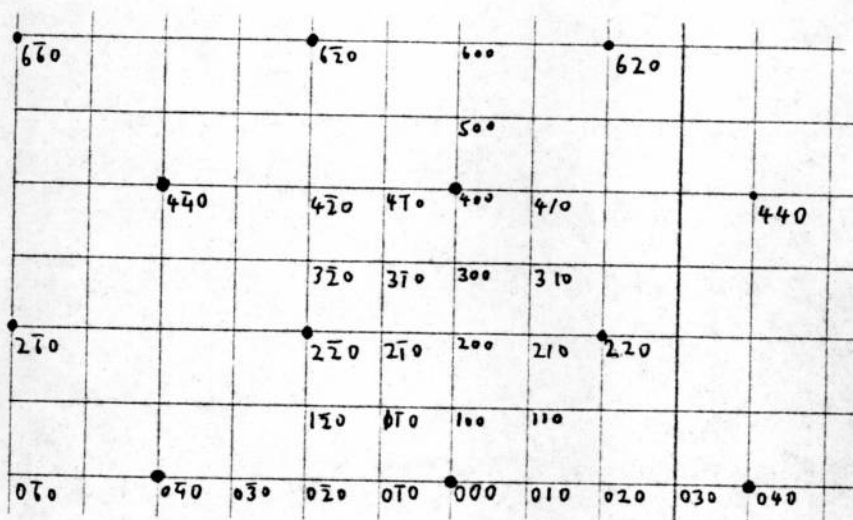
RHEEDでは試料表面すなわち電子線を入射させるので、試料と電子線の両方に垂直な逆格子面について考えよう。

⇒ [011]入射なす 100 と 011 と軸と対面

[001]入射なす 100 と 010 と軸と対面

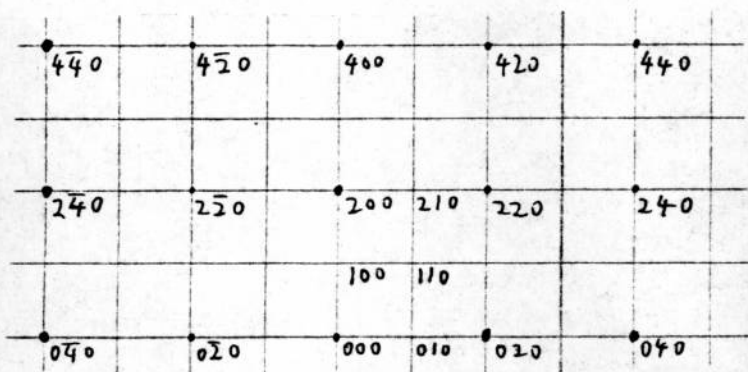
で下半分は試料のかけたなでパターンは見えない。

Si と SiC で 逆格子を描き構造因子を用いて目振の生ずる点に 'o' 印をつける。

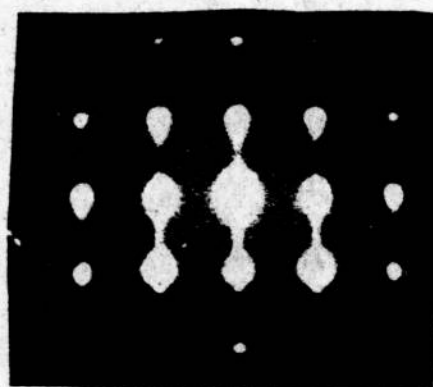


← Si(100)の [001]入射

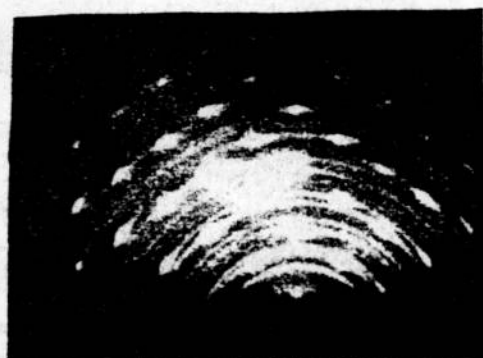
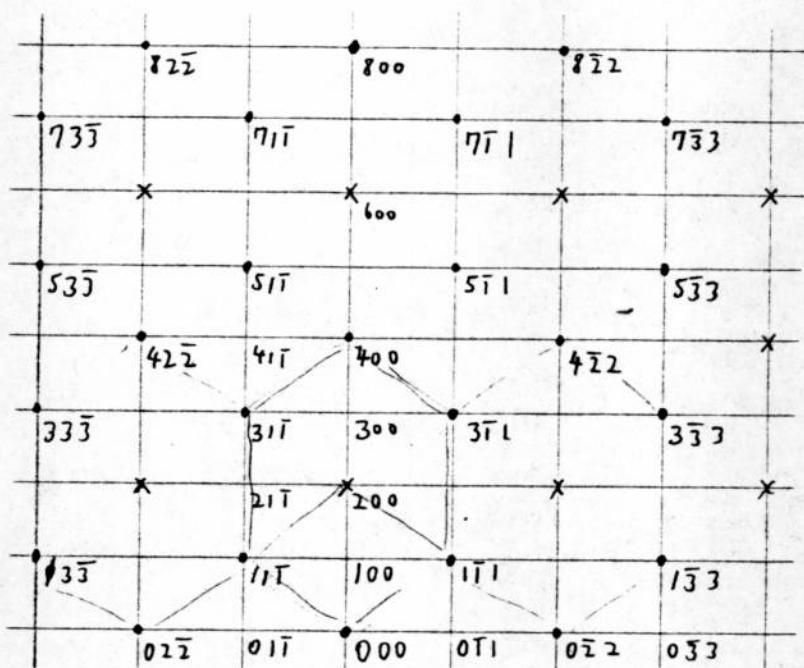
↓ Si(100)表面をラッピング(反
日)の [001]入射のパターン



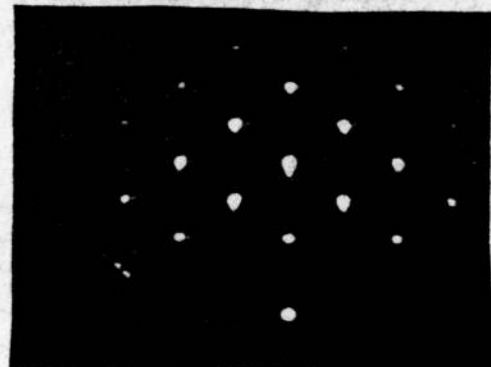
← β-SiC(100)の [001]入射



← Si(100)
上の炭化
層の
パターン



Si (100)



SiC (100)

[011]入射だと Si では '•' 印だけ SiC では '•' と 'x' が回折点として現れるハズ。しかし上の写真見たとどっちも同じパターン!? これは 2重(多重)回折が生じたためである。

結晶に対する入射線の方向が適当であると、Ewald 球の上に2個以上の逆格子点のことがある。これは二つ以上の格子面に対して Bragg 条件が同時に満たされることに相当する。いま、図 5・19 に示すようにベクトル $H_1(h_1k_1l_1)$ と $H_2(h_2k_2l_2)$ で表わされる二つの逆格子点が Ewald 球の上ののっていたとすると、たまたま H_2 に対する構造因子がゼロであってもこの反射が現われるのである。この現象は、入射線が $(h_1k_1l_1)$ 面によって一度反射され、さらにもう一度 $(h_2-k_1, k_2-l_1, l_2-l_1)$ 面によって反射されて、ちょうど $(h_2k_2l_2)$ 面による反射位置に現われると考えれば理解できる。

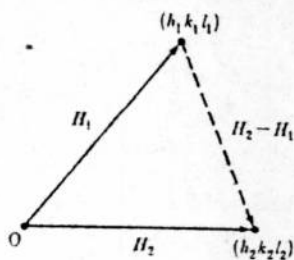


図 5・19 多重回折

この種の反射の強度はかなり大きく、ときには他の反射と同程度の強度をもつ

$$h_1, k_1, l_1, h_2, k_2, l_2$$

反射が出る

↓

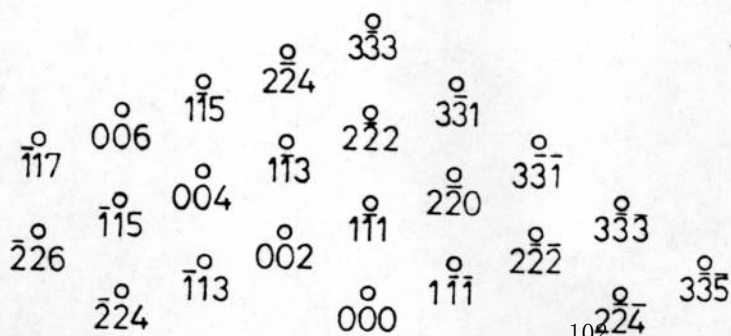
$$h_1 \pm h_2, k_1 \pm k_2, l_1 \pm l_2$$

も出る

↓

$$\pm n h_1 \pm m h_2, \pm n k_1 \pm m k_2, \pm n l_1 \pm m l_2$$

全て出る。



← これは β -SiC (111) の

[110] 入射のパターン

[211] 入射は : : : となる

風に吹かれ、や、てみてもいい。

最後に スポットとストリーフ

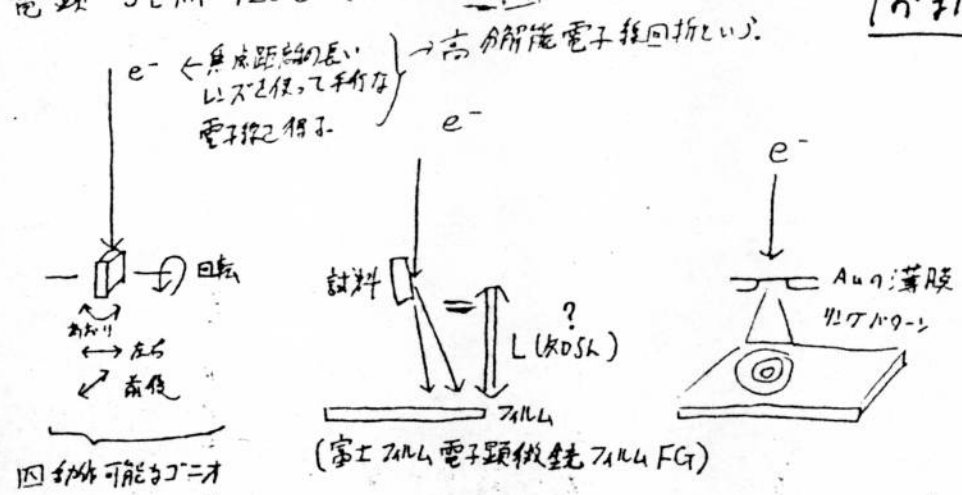
表面凸凹だと実質的に透過と同じことになる

スポットパターンが出来ます

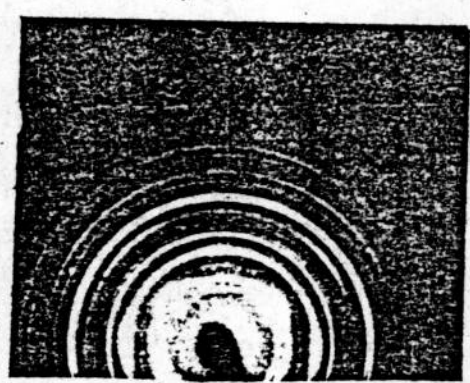
表面平な時は入射角が浅く、電子が入り深さも浅いのと逆格子
 点か試料に対して垂直に伸びストリーフパターンが出来ます
 「もし平ら」だとある種のスポットパターンになるという人がいますか通常はそこまで考えなくてよい。

電顕 JEM 120B (40 KeV, 0.070/100, 120)

おまけ



デハビエ環から222までが製品



Au 面心立方格子 → 構造因子は Zinc blende と同じ

$$a = 4.0786 \text{ \AA}$$

構造因子: $h \cdot k \cdot l$ 偶数混じり $F_{hkl} = 0$

$h^2 + k^2 + l^2$	0:000	7: ?
	1:100 x	8: 220 0
	2:110 x	9: 300 x
	3:111 0	10: 310 x
	4: 200 0	11: 311 0
	5: 210 x	12: 222 0
	6: 211 x	13: 320 x

- ↑
- 明瞭な222
- 111 $r = 0.925$
- 200 $r = 1.075$
- 220 $r = 1.515$
- 311 $r = 1.775$
- 222 $r = 1.865$ (cm)

$$d \propto (h^2 + k^2 + l^2)^{-1/2}$$

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

$$d \cdot r = 2.19 \text{ (nm)} \Rightarrow 1 \text{ nm は } 2.19 \text{ \AA}$$

もしもこの中で ライゾール, 菊池系, 双晶のパターン, 欠陥の影響, SiCの111と
 p-type に対するパターンの求め方はハズ。

一応用編一

「CVD成長した β -SiC表面のRHEEDとFJ観察」

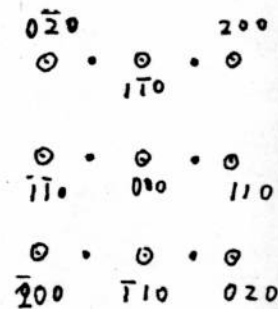
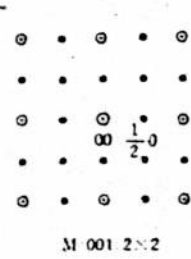
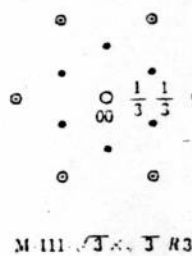
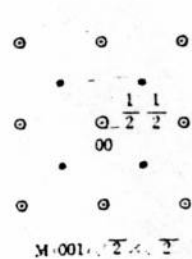
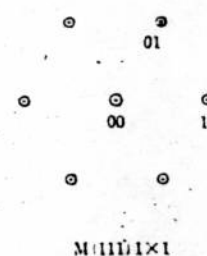
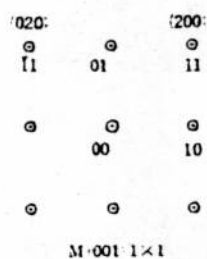
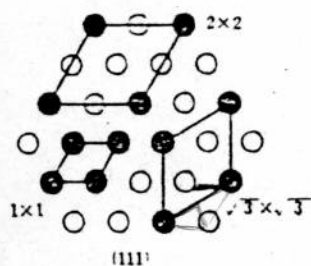
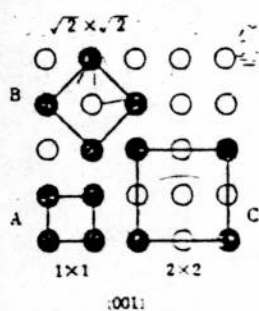
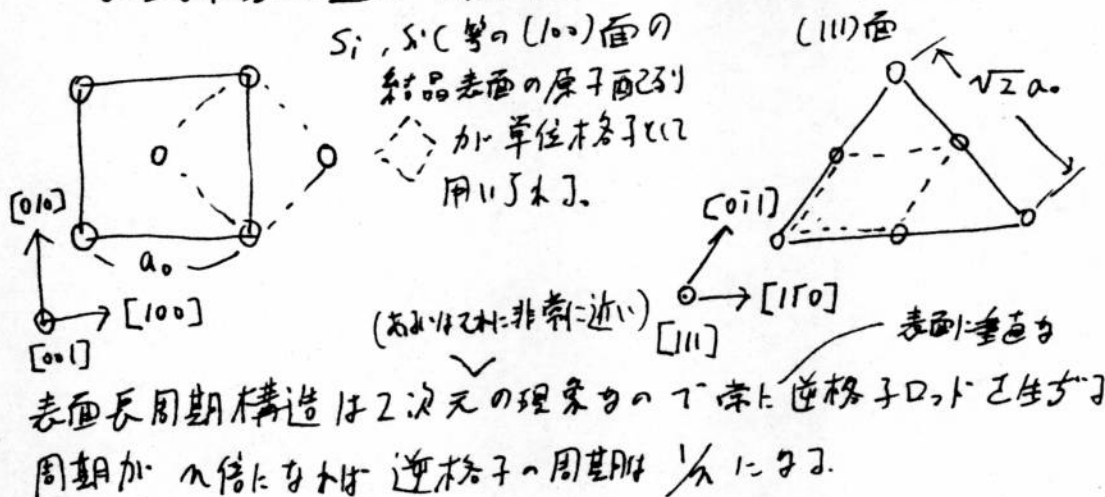
Si(100)基板の上に成長した β -SiC(100)の表面をRHEEDで観察すると2つの異なる現象が見られる。

$\langle 011 \rangle$ 入射 $\rightarrow 5 \times 1$ (6 $\times$ 1)の表面長周期構造

$\langle 010 \rangle$ 入射 $\rightarrow$ 円弧状ストリーク

*結晶表面にはしばしば長周期構造が観測される。

原因は結晶表面の再配列、異原子の付着、吸着、step等様々である。
表面長周期構造法の周期は結晶の表面の原子配列を用いて表わされる



正格子には
000は
002, 004, 006...
の集合
(h, k, l = 00, 00, ...)

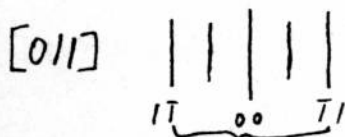
図 7-12 表面構造の単位メッシュと LEED 図形

結晶表面の逆格子の様子を真上から見たと考えるべき。

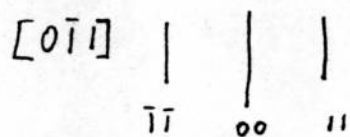


RHEEDでは

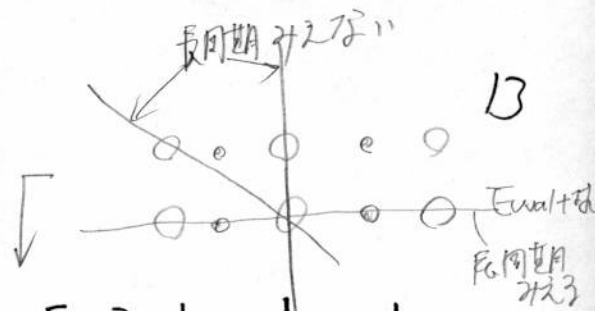
何れは zinc blende (100) の 2×1 構造では



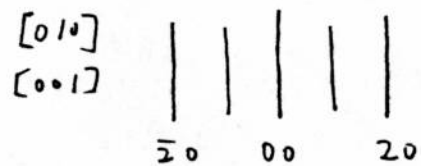
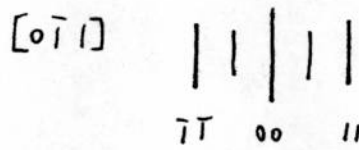
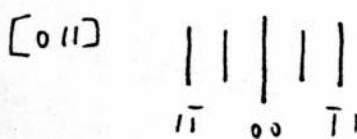
超周期構造が見える。



長周期が見える。



2×2 では



全て長周期が見える。

この他ラウエゾーン (m/n のラウエゾーン) が出現するか今回ラウエゾーンは説明していないのでパス。

↑ 二つで一般論解説

図1, 2 を見て. β -SiC (100) 表面の超周期構造を見る

antiphase domain 有 (APD: 関しては春の研究会で説明した) (パス)

→ $[0\bar{1}1]$, $[011]$ 入射共 5 倍の長周期が見えている。 5×1 との重ね合わせでね。
 $[010]$: では長周期なし 1×5

antiphase domain 無

→ $[0\bar{1}1]$ 5 倍 $[011]$ - $[010]$ なし → 確かに 5×1

⇒ RHEED を用いて APD の有無が確認できた。

そこで円筒状ストリークの起原は何か?

→ 逆格子 plane (マシット) である。

結晶表面又は結晶が針状であるなど一次元構造がある場合逆格子空間に点でもロッドでもなく平面を生ずる。これを逆格子 plane 又は逆格子シートと呼ぶ。

逆格子 plane が存在していると Ewald 球とこれが交わる軌跡がスクリーン上に投影したとき図4のように円筒状ストリークを生ずる。

一次元構造に垂直に逆格子 plane は生ずる。

逆格子プレーンがスクリーンに平行又は垂直な時は円筒状ストリークを伴う。
(ラウエゾーン, 直線のストリークを伴う)

• $[011]$, $[0\bar{1}1]$ 入射では円筒状ストリークは見えない。

⇒ 逆格子 plane は $[011]$ 又は $[0\bar{1}1]$ に垂直

円筒状ストリークの形状は次式で表わせる。

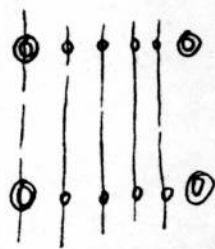
$$[x/(L \sin \theta) - L \sin \theta]^2 + y^2 - L^2 \sin^2 \theta = 0$$

(x, y, θ は図4を見よ) L は $h \times$ 長さ

- この式と簡単な幾何学的考察を用いて、逆格子 plane は $[011]$ に垂直であると結論づけられた。図2の中に得られた逆格子の様子を描いた。
- $[011]$ 入射では非常に長いストリークが見える。これは逆格子 plane がスクリーンに垂直に存在しているためである。これは $diffused streak$ と呼んで普通のストリークと区別する。
- $[0\bar{1}1]$ 入射では Ewald 球に逆格子 plane が接触するため厚点付近が明るくなっている。

[何故逆格子 plane が生じたか?]

表面に一次元構造が存在しているのは確かだ。表面とは 5×1 の長周期構造がある。この構造と共存している。図6のようである。直線上に配列ではない。図5のようである。out-of-phase disorder は 5×1 に適用できるか。この場合 $[011]$ に垂直でしか



← この図のようには観測されているはず、と多数の逆格子 plane が生じている。

- linear arrays は図7のよう。 5×1 の長周期構造のユニットが描いて形成されているのではないか?

念のため簡単なシミュレーションを行う。

2次元のメッシュに与える波(電子線などではない)の回折を考慮する
格子の位置は

$$R_n = m_1 a + m_2 b \quad (m_1, m_2 \text{ 整数})$$

と表わせる。

入射波と反射波の単位ベクトルを s_0, s とし $\phi = \frac{1}{\lambda} (s - s_0) \cdot R_n$ とおくと
厚点 O と R_n の格子により散乱された波の位相差は

$$\frac{2\pi}{\lambda} (s - s_0) \cdot R_n = 2\pi \phi \cdot (m_1 a + m_2 b)$$

と表わせる。

格状

したが、2次元格子全体の散乱の合成振幅は各格子の散乱因子を f とすると

$$F = \sum_{m_1, m_2} f \exp\{2\pi i \mathbf{S} \cdot (m_1 \mathbf{a} + m_2 \mathbf{b})\}$$

ここで f は無視してかまわないので

$$G = \sum_{m_1, m_2} \exp(m_1 2\pi i \mathbf{S} \cdot \mathbf{a}) \exp(m_2 2\pi i \mathbf{S} \cdot \mathbf{b})$$

を考えた。5x1格子に与えられた格子定数は $\lambda = 10^{-2}$

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} 5 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} p \\ q \\ r \end{pmatrix} \quad \text{とすると} \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} p \\ q \\ r-1 \end{pmatrix} \times 10^2$$

$$G = \sum_{m_1, m_2} \exp\{(2\pi i 5 p m_1 + 2\pi i m_2 q) \times 10^2\} \quad \text{--- (A)}$$

$$= \sum_{m_1} \exp(2\pi i 5 p m_1) \sum_{m_2} \exp(2\pi i m_2 q) \times 10^2 \quad \text{--- (A')}$$

(A) または (A') を用いて $G \cdot G^*$ を求めれば $\mathbf{S}$ の方向の散乱強度が求まる。

ここで $p \gg 1$ となるように p, q をとれば散乱角の小さな部分での散乱強度を求めることができる。

結果

図8-(A) 5x1格子に格子定数がない時、5x1の基本格子に与えられたベクトルのみが見える。

B-1 → **B-3** 図-7の様子やりかた直線的に抜いていくと、5x1の5xの方向に小ベクトルが通っていき、

C-1 → **C-2** 図-7と直角の方向に抜いていくと小ベクトルの連なりも **B-m** と直角の方向に進む間隔も $1/5$ である。

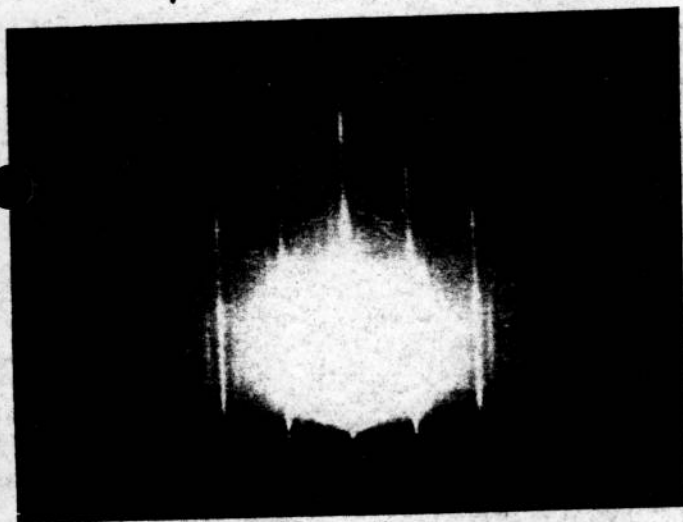
D-1 → **D-2** 全くランダムに抜いていくと B, C のような規則的な小ベクトルは出現しない。

⇒ 結論: 図7のようになっている。

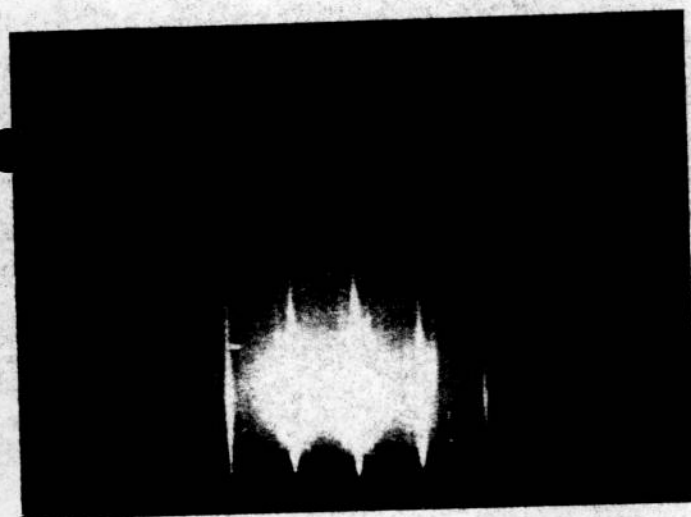
昔コンピュータが無い頃日新と穴とネリて夫の干渉パターンとを求めて二人の議論に及んでた。

○ 上級は各自極めて下さい。

antiphase domain



$[0\bar{1}1]$ azimuth

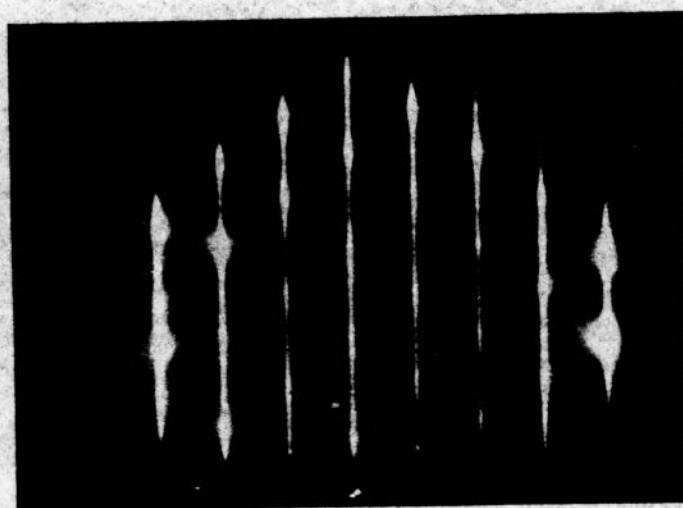


$[011]$ azimuth

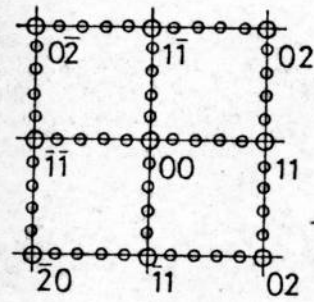
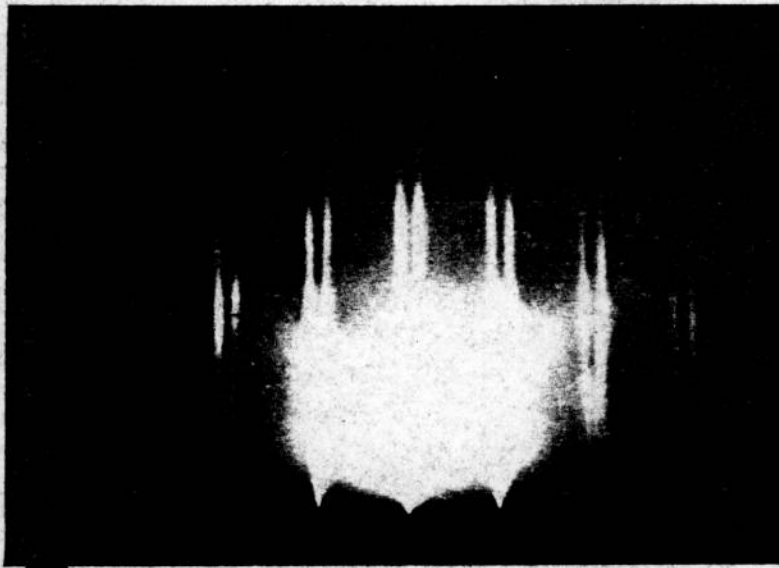
antiphase domains free



$[0\bar{1}1]$ azimuth

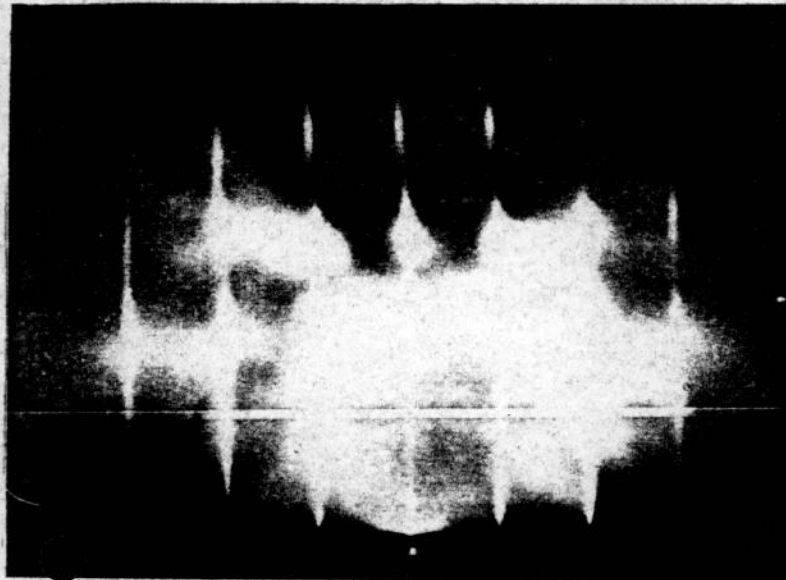


$[011]$ azimuth

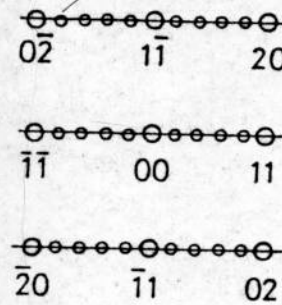


90°回転させて
足し合わせる。

antiphase domain



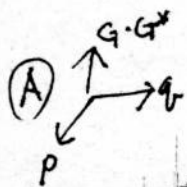
右面
長持造によるもの



antiphase domains free

$[010]$ azimuth

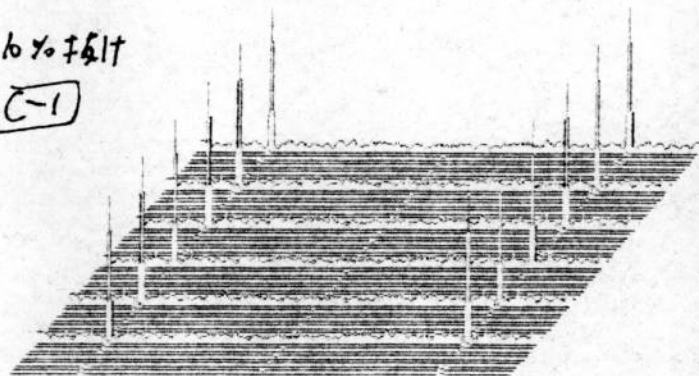
12/2



↑ 5x1 メッシュが全て埋まっている時

10% 抜け

C-1

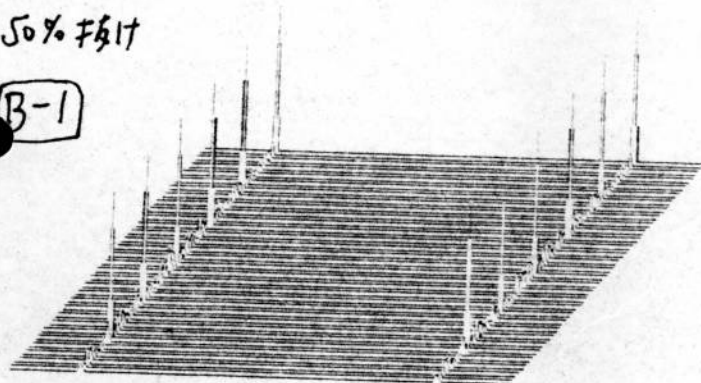


↓ 図7の直交方向に /

arrays が
7.37.03

50% 抜け

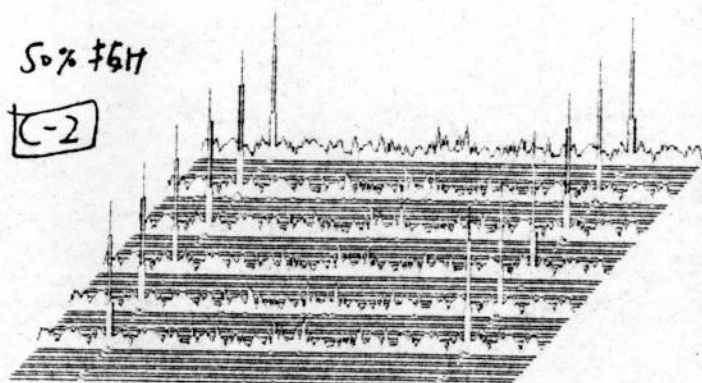
B-1



↓ 図7のFに 5x1 が 配列し linear arrays
を 作る 時

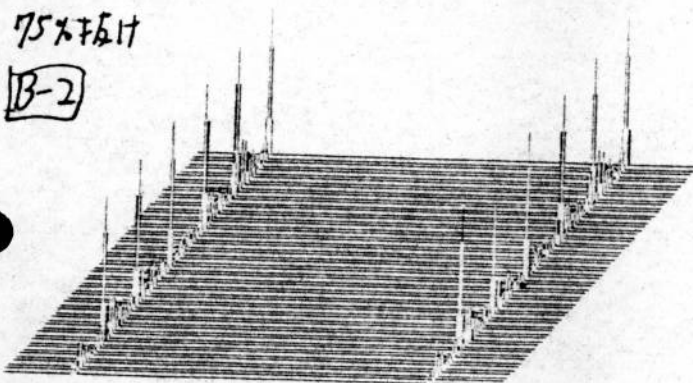
50% 抜け

C-2



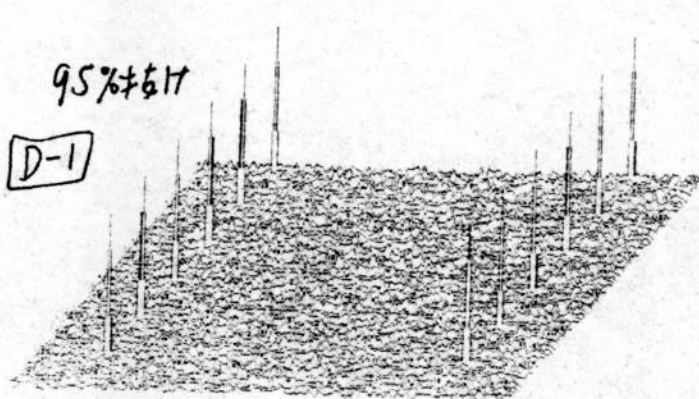
75% 抜け

B-2



95% 抜け

D-1

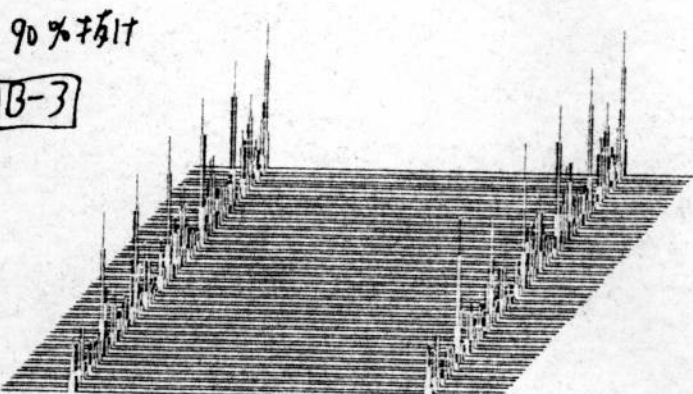


↓

↑ ランダムに 抜いた 時

90% 抜け

B-3



50% 抜け

D-2

