

安定状態にあり、加熱処理により、NaCl型結晶で推測されている⁴⁾のと同じ構造の O^{2-} が Mg^{++} に比べて上に飛び出す安定状態に転位すると考えられる。そうすると、準安定状態はポテンシャルの井戸が浅いため、小さな θ_D となり、図3の温度変化が不可逆過程になることも説明できる。これは110Vの加速電圧で測定したエネルギー損失スペクトルで、 Mg^{++} の $(2p)^6$ の電子が、主に3sおよび3d電子が作る伝導帯(Γ 点でそれぞれ Γ_1 , $\Gamma_{25'}$ の対称性のバンド)へ遷移するときの非弾性散乱電子の強度変化によっても支持された。また準安定状態のときにのみ菊池バンドの強度の増大がみられることは、電子は格子振動の光学枝の縦波を励起する断面積が大きいことを考えあわせると、このモデルでいろいろな実験事実がよく説明できる。

このように結晶表面に局在した回折波すなわちバンドギャップ内の電子を用いることにより、菊池像が固体表面物性の研究に大いに利用できることを示すことができた。そしてこれらの回折の機構などにまだ不明な点が多いので、討論していただきたく、話題を提供した。

参 考 文 献

- 1) S. Kikuchi, Proc. Imp. Acad. Japan, 4 (1928) 271, 275.
- 2) Y. Kainuma, Acta Cryst. 8 (1955) 247.
- 3) 大槻義彦, 日本物理学会誌 30 (1975) 322.
- 4) G. C. Benson, P. I. Freeman and E. Bempsey, J. Chem. Phys. 39 (1963) 302

MOS構造の界面準位の模型計算

広大・工 大 阪 之 雄

金属と SiO_2 膜とSiよりなるMOS構造は、実用的に広く用いられ、またTechnology的には最も完全な界面と考へられている。この SiO_2-Si の界面に、Siのdirect gap中に存する界面準位の存在が知られている。この準位の性質については、例えば、Goetzberger, Heine, Nicollianによるcharged centerによる模型があるが、実際

は、その性質および起源については、ほとんど判っていない。この小論では、この界面準位の模型計算について述べる。

direct gap 中の界面準位密度は、ほぼ $(10^{11} \sim 10^{10}) / \text{cm}^2$ で、これは Si の表面原子密度の 10^{-4} の程度の量である。界面準位については、Shockley Theorem として知られる次の事実がある。bonding と antibonding 物質の界面にのみ、表面原子数と同程度の界面準位が存する。

この物理的意味は、界面における結合の misfit のための dangling bond による界面準位の発生と考えられる。我々は、 SiO_2 と Si を bonding 物質として、界面準位の存在しない理想的な界面を導入する。それで、実際に生じている界面準位は、この理想的界面よりのずれにより生ずると仮定する。実験的に測定されている界面準位は、Si 中のフェルミ準位を変化させた時、Si 側に生ずる excess charge により定義されている。それで我々の計算量は、 SiO_2 側に原因を持ち、Si 側の direct gap 中に生ずる extra density of states である。

理想的界面よりのずれの因子の内、intrinsic なものとして次の二つが考えられる。一つは、 SiO_2 膜の厚さが薄い時、gate metal の電子の透過により生ずるものである。もう一つは、 SiO_2 は実際は非晶質構造を有するので、 SiO_2 が理想的ガラス構造を持つ時生ずる界面準位である。extrinsic なものとしては、 SiO_2 -Si 界面近くの種々の欠陥によるものがある。今迄の界面準位の模型は、全てこの後者のものである。以下、intrinsic なものに議論を限る。

gate metal に起因する界面準位は、実験との比較より、 SiO_2 膜が 20\AA 以下でのみ有効なことが結論される。また、理論値は、 10\AA の SiO_2 膜をもつ Schottky バリア形の MOS の界面準位密度の推定値と一致する。

次に、 SiO_2 膜が非晶質のために生ずる界面準位を次の手続で計算する。 SiO_2 の特定の原子配列に対する界面準位密度の表式を、原子配列について assemble average をとる。この量の模型計算として、非晶質の局在準位は、完全ランダムな“不純物”により生ずる伝導帯または価電子帯の tail state とする。こうすると、functional integral の方法が用いられ得る。重要な結論は、他の自由度 (phonon 等) による非晶質の局在準位の巾を考えないと、界面準位が生じないことである。界面準位を生ずるために SiO_2 の local order のみで定る $\text{Si}-\text{O}$ bond の伸縮振動による局在準位のガウスの巾を考

慮する。さらに、functional integral 法の遂行には、最もかんたんな Edward の mean field theory を用いる。三次元の場合に、Si については Penn の模型を用い、近似計算を行った。最終の結果に生ずる未定のパラメータは、非晶質構造の tail state の状態密度を定める exponential tail のエネルギー巾に対応する量である。実験的には多くのカルコゲンガラス（理想的ガラスと考えられている）および非晶質石英についてこの量は、0.05 eV ~ 0.07 eV と評価されている。この値を用いると、direct gap 中の界面準位密度は、 $10^{11} \sim 10^{10} / \text{cm}^2$ となった。これにより観測されている界面準位の或る部分は、上述の機構で生ずる intrinsic なものと推論される。

ヘリウム原子線散乱による 表面格子振動の研究

北海道大学触媒研究所 浅田 洋
戸谷 富之

固体の表面格子振動に関する知見は、実験方法が少なく、また難かしいために、バルクに関する知見と比べると非常に乏しい。我々は銀の表面からの He 原子線の散乱の実験を行い、銀の表面格子振動に関連したいくつかの知見を得た。

実験：図 1 に実験装置の概念図を示す。原子線の空間的半値幅は、検出器の回転角で、 3° である。実験はノズルの温度が 300°K と 150°K の二通りで行った。それぞれの場合における入射原子線のエネルギーは 65 meV, 32 meV, 波数 K は 11.1 \AA^{-1} , 7.9 \AA^{-1} である。検出器は円形のスリットをもった溜めこみ型のもので、得られる原子線強度は線束に比例する。検出器のスリットが試料表面の中心に対してなす角は $2^\circ/2'$ である。試料の銀表面は雲母の劈開面に真空蒸着したものをを用いた。蒸着時の雲母の温度は 570°K , 真空度は $1 \sim 3 \times 10^{-7}$ torr である。（この条件では表面に垂直に $[111]$ 軸が配向するとされているが本実験では未確認）蒸着後、同温度で入射面内で散乱角分布を測定した。

結果と検討：図 2 は入射角 θ_i が 70° の時の He 原子線の散乱角分布である。角度