

Model を用いて小さな Hubbard gap を持った絶縁体と金属を contact させて界面近くの電子の状態密度を計算してみた。²⁾ 結果は金属側の状態密度はあまり変化を受けないにもかかわらず、絶縁体側の界面近くの状態密度は大きな変化を受け、特に一層目は parameter のえらび方にもよるが金属状態になることがわかった。最後に一体によって記述される(同期 potential による) energy gap ではこのような大きな変化は期待できないように思えることをつけ加えておく。

- 1) P. W. Anderson: Elementary Excitations in Solid, Molecules and Atoms part A, ed. J. A. Devreese, A. B. Kunz and T. C. Collins (Plenum Press 1974)
- 2) A. Okiji, H. Kasai and S. Terakawa: J. Phys. Soc. Japan **44** (1978) 1275, Surface Science **86** (1979) 529

11. OS 界面の微視的構造と MOS 電子状態

九大教養 中山正敏

MOS 構造の半導体(例えば Si)中の電子構造は、通常有効質量近似によって計算される。酸化物(例えば SiO₂)との界面の影響は、界面近くのポテンシャルが原子的尺度で Si 内部のポテンシャルから外れている事を考えると、Si 内部から入射した Bloch 波の散乱として扱かうことができる。Sham-Nakayama [Phys. Rev. **B20** (1979) 734]によれば、この散乱は伝導帯の底近くでは、散乱距離 a_s と谷間結合係数 α によって表わされる。Si のバンドを記述する① k·p 模型、および② LCAO 模型を用い、界面を、①では無限壁の位置、②では界面層の対角シフトをそれぞれパラメータとする粗い模型で、計算を行なった。結果は、これらのパラメータの値に敏感であり、このことは Bloch 波の散乱が界面の微視的構造に敏感な性質を持つことを示唆している。

実験的にも、①(001)面における α の推定値のばらつき、② Nicholas 等による(001)面でのランダウ準位の 8 本への分裂、③(001)面からわずかに傾いた段丘構造を取ると思われる面での、大きな谷間結合、④(111)面における試料による縮退度の違い(6重、2重)、などの事実があり、これらのうちのいくつかは、界面の不均一性、界面の対称

性の乱れによるものと考えられる [実験の詳細については, 「2次元系の電子的性質国際会議報告」第2回 (Surf. Sci., vol 73, 1978), 第3回 (work book, 1979) を参照のこと]。より現実的な模型にもとづいた, 立入った計算が望まれる。

13. 半導体表面の電子状態に対する表面緩和効果

金沢工大 西田昌彦

共有結合型半導体の(111)表面並びにⅢ-V族半導体の代表格であるGaAsの(110)表面は, 真空中で結晶を劈開することによって容易に得られるため, その電子状態は実験的且つ理論的にかなり良く調べられている。

一方, Ⅲ-V族半導体の(111)表面については, それが劈開面でないため表面の作成が難しく, その電子構造に対する電子分光法的測定はほとんどなされていなかったが, 最近Arによるスパッタリングの方法や分子線気相成長法によってGaAs(111)面の作成が容易となり, その電子状態もUPSによって調べられている¹⁾。

GaAs(111)面はGaのみからなる原子面とAsのみからなる原子面とが $\langle 111 \rangle$ 方向に交互に配列しており, 従って, その(111)表面原子層はGaのみからなる(GaAs(111)Gaと名付ける)か或いはAsのみからなる(GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)Asと呼ぶ)ということになる。すなわち, GaAs単結晶の表側がGa面であるとすれば, その裏側はAs面である。このように, GaAs(111)表面には二種類有り, GaAs(111)GaとGaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)Asに対する電子構造とそれに対する表面緩和効果には大変興味を持たれる。

本報告では, GaAs(111)表面の電子構造に対する表面原子層の緩和効果について, 一電子近似の分子軌道法である拡張ヒュッケル法(EHT)を用いて調べた結果を論ずる。バンドギャップ付近の特に大きい強度をもつ表面状態については既に報告してある²⁾。ここでは, weak resonance並びにイオン性ギャップ付近の表面状態をも含めて論ずる。

調べる表面構造は, GaAs(111)Gaに対してはrelaxしてない理想表面, 表面Ga原子層が 0.26 \AA ばかり内側へrelaxした表面, 及び完全にrelaxした表面(Ga原子