

## 20. Si(111)再構成表面の電子状態

藤田真理

Si(111)7×7表面の電子状態を研究するために局所密度汎関数法を用いて第一原理からのバンド計算を行なった。Si<sup>++</sup>のイオン核には norm-conserving pseudopotential を用い、self-consistent な計算から価電子に対する一電子の固有エネルギーと固有関数を決める。7×7構造の単位格子はこのような計算には大きすぎるので、より小さい単位格子を持つ計算のための構造模型を考えた。7×7表面の原子構造模型である DAS 模型は次の様な特徴を持つ。

stacking fault	(1/2)
dimer	(9)
adatom (DB)	(12)
corner hole (DB)	(1)
1st layer DB	(6)

DB は dangling bond の略である。() 中の数字は、単位格子に含まれる個数を示している。(1/2) は単位格子の半分の部分にだけ存在する事を意味する。

この特徴の内のいくつかを取入れた 2×2 及び 3×3 構造の模型に対してバンド計算を行なった。2×2 構造には、dimer と corner hole が含まれていないが、3×3 構造には存在し、代わりに 1st layer DB が含まれていないので、2つの構造模型は相補的である。

2×2 及び 3×3 構造のバンド計算の結果、バンドギャップの中に 3種類の DB の性質を持つ表面状態が現れ、それらの間のエネルギー位置の関係が明らかになった。corner hole DB 状態と 1st layer DB 状態はほぼ同じエネルギー位置に現れ、adatom DB 状態はその 0.2~0.3eV 高いエネルギー位置に現れる。

また、得られたエネルギー固有値の分散関係に tight binding 的描像を適用すると有効 transfer を見積もる事ができる。特に、dimer を間に挟む adatom 間の有効 transfer が、他の表面原子間の transfer に比べて非常に大きい事を見出した。

つぎに、5×5 構造に対するバンド計算を行なった。5×5 構造模型は個数は異なるが DAS 模型の特徴を全て含んでいる。5×5 構造に対するバンド計算の結果は、2×2、3×3 構造の結果から予想される範囲内の結果であったが、5×5 構造の計算によって、各 DB 状態の混成の様子がより理解されるようになった。また実験において、stacking fault の影響であると考えられる非対称性が観測されていたが、この非対称性も 5×5 構造の計算によって、はじめて説明する事ができた。

これらの計算結果から実際に存在する 7×7 表面の電子状態を予想した結果、局所状態密度のスペクトルは実験と定性的に一致した。しかし、各ピークのエネルギー間隔は実験結果よりもかなり狭くなる事が分った。