

6. 半導体表面再構成と化学吸着

東大物性研 中 村 勝 弘

半導体の弾性的性質は keating モデルにより正しく記述される。このモデルに基づく strain energy は、2 体中心力を記述する bond-stretching 項と 3 体非中心力を記述する bond-bending 項とからなる。後者の項は半導体の sp^3 混成軌道を反映し、大きなすき間をもつ共有結合構造を安定化させるのに重要である。

一方、半導体表面の再構成には dangling bond が重要な役割を果す。短周期の表面再構成の典型である $Si(001)-2\times 1$ 構造では、表面第一層の隣接する Si 原子の dangling bond が dimer bond をつくる。この事実を反映して keating モデルに表面項を追加し系の自由 energy を最小にすることにより、内部数層に及ぶ原子変位の pattern⁽¹⁾ やゆらぎ⁽²⁾ が正しく計算され、LEED の I-V spectra を合理的に説明しうる。

又、長周期の再構成の典型である $Si(111)-7\times 7$ 構造では、井野氏⁽³⁾ により表面 unit cell あたり 3 個の vacancy が発生するとされている。Lander-Morrison の言うように第二層と第一層の Si が double bond をつくとすれば、unit cell 内の原子変位の pattern は vortex 状になっていると期待される。適当な表面項を追加し keating モデルでこの pattern を計算し、fractional-order beam の I-V spectra⁽⁴⁾ を導きたいと考えている。再構成面への化学吸着について検討中である。

[文 献]

- 1) J. A. Appelbaum and D. R. Hamann 1978 Surf. Sci. 74 21-33
- 2) K. Ohkuma and K. Nakamura 1979 J. Phys. C12 L835-39
- 3) 井野正三, 本研究会, To be published in J. J. A. P.
- 4) 井野氏の最後のスライドの I-V spectra は (0, 0) beam のものであり、面に平行な原子変位の pattern は全く反映されていない。