

9. 再構成表面の異方的電子線エネルギー損失

阪大基礎工 張 紀久夫

Si(111) 2×1 再構成面のイオンのモデルに関して、以前に提案した赤外吸収の著しい偏光依存性に対応して、同じ遷移を電子線エネルギー損失で観測する場合のスペクトルにも、失われた波数ベクトルの方向に依存する著しい違いがあることを示した。実験的観点からは、赤外吸収に比べて、使用すべき 2×1 再構成面のドメインが小さくて済むという利点があると考えられる。

10. 絶縁体（半導体）・金属界面の電子状態

阪大工 興 地 斐 男

半導体にはイオン結晶的な大きな energy gap を持ったものと、covalent な半導体 (Si, Ge) と呼ばれる小さな energy gap (1~2 eV) を持ったものがある。金属とこれらの半導体の界面の電子状態を考えると、後者は contact する金属の種類によらずに Schottky barrier の高さが一定になっている。このことの説明には従来 surface state を考慮した Bardeen-Shockley の考えを用いてきたが、Anderson¹⁾ は金属と半導体を contact させると半導体の表面近くで小さな Energy gap は消失することを指摘し、上の事実の説明を試みている。彼の考えは Si, Ge 等の covalent な半導体の小さな energy gap は電子の多体効果によって生じたものとし、金属と contact することによる金属の電子の screening 効果により、界面近くで半導体の energy gap は消失するというものである。そのために半導体側の表面近くで Fermi energy level の pinning が起こり金属の種類によらない Schottky barrier の高さの説明ができるとした。surface state の考えを用いた従来の考え方は metal との contact を考えたとき、もはや localized state とは考えにくく Anderson のこの指摘は重要なものと我々は考えた。そこで Hubbard

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. B **20** (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 $k \cdot p$ 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