

| | |
|--------------|---|
| Title | Theory of the Reconstruction of the (111) Surfaces of Si and Ge |
| Author(s) | 坂本, 好史 |
| Citation | |
| Issue Date | |
| Text Version | ETD |
| URL | https://doi.org/10.11501/2964349 |
| DOI | 10.11501/2964349 |
| rights | |
| Note | |

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

【3】

| | |
|---------|---|
| 氏名・(本籍) | 坂 本 好 史 |
| 学位の種類 | 理 学 博 士 |
| 学位記番号 | 第 9 6 2 9 号 |
| 学位授与の日付 | 平成 3 年 3 月 26 日 |
| 学位授与の要件 | 理学研究科 物理学専攻 学位規則第 5 条第 1 項該当 |
| 学位論文題目 | Theory of the Reconstruction of the (111) Surfaces of Si and Ge (シリコンおよびゲルマニウムの表面再構成の理論) |
| 論文審査委員 | (主査) 教授 金森順次郎 (副査) 教授 邑瀬 和生 教授 大坪 久夫 助教授 城 健男 助教授 阿久津泰弘 |

論 文 内 容 の 要 旨

Si および Ge の (111) 表面は、それぞれ (7×7) および $c(2 \times 8)$ 秩序状態から無秩序状態へ相転移する。これらの表面の無秩序状態は電子線回析実験によって調べられていて、Ge (111) に対しては (2×2) Bragg 点付近にスプリットした散漫散乱スポットが、Si (111) に対しては $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ Bragg 点付近に散漫なスポットがそれぞれあらわれることが知られている。本研究では、これらの表面上の吸着原子の配置を三角格子上の格子ガスの粒子の配置と見做し、下地の効果をその粒子間の相互作用として取り入れることによりモデル化し、その有限温度での振舞をモンテカルロ計算により詳しく調べることにより、この問題を取扱った。

Ge (111) 表面の再構成に対しては、 $c(2 \times 8)$ 構造を秩序状態とする第六近接までの相互作用を仮定した。先づ、このモデルが秩序状態から無秩序状態への一次の相転移を再現することを示した。次に無秩序状態での運動量空間二体相関関数の温度変化を計算し、このモデルが電子線回析パタンの温度変化をよく再現することを示した。これらの計算に基づいて、この表面の無秩序状態で見られる特異な回析パターンがその中で (2×2) の粒子配置を取る多角形のドメインに分かれた構造から生じることを明らかにし、このドメインの頂点部分にあらわれる互いに第二近接位置にある三粒子からなるトリプレットとこの系のエントロピーとの関係を明確にすることによりこの特異なドメイン構造が無秩序状態であらわれるメカニズムを明らかにした。

Si (111) 表面の再構成に対しては、DAS 構造が (7×7) 配列を安定化する機構を積極的に取入れて拡張した格子ガスモデルを構築した。このモデルが相転移および無秩序状態で見られる散漫散乱パターンを再現することを示し、Si (111) 表面の秩序・無秩序両状態をよく記述するモデルであることを

明確にした。次に、このモデルを用いて、Si (111) 表面の秩序状態を特徴づける積層欠陥がその無秩序状態では消失するべきであることを明らかにした。

Si と Ge (111) 表面の再配列構造は一見全く異なって見えるが、格子ガスモデルの立場から見ればその共通点が明らかとなる。非整合壁と互いに第二近接位置にある三粒子からなるトリプレットというふたつの言葉を用いて、これらの表面の再構成を統一的に理解することができる。

論文審査の結果の要旨

結晶表面の原子配列は、一般に結晶内部に比べて何等かの変化があり、しかも温度によって相変化することがある。坂本君の研究題目となったシリコンおよびゲルマニウムの表面 (111) 面および (100) 面はそれぞれ極めて特徴的な再構成が行われ、また特定の温度を境として大きく変化する。半導体表面としての応用面からの他に表面再構成の典型としても、その機構の解明が多くの研究者の関心を集めている。

坂本君は (111) 面の再構成について、シリコンおよびゲルマニウムで見出されている諸実験事実を統一的に説明する理論を提出した。これらの物質の (111) 面では結晶を切断したとき表面となる原子面は三角格子を作るが、それぞれが表面に垂直の方向に伸びた不對電子の軌道をもっている。その数を減らすために、余分の原子がこの表面原子面の上に分布し、それぞれが3つの表面原子と共有結合を作る。この余分の原子は、あたかも化学吸着された原子のように振舞うので吸着子と呼ばれる。吸着子の位置はそれ自身三角格子を作っている。ゲルマニウムは低温では単位胞の1辺が三角格子の単位胞のそれぞれ2倍と8倍となる $c(2 \times 8)$ (c は面心を意味する) 構造であり、約 300°C で元の三角格子の単位胞 (1×1) に転移する。坂本君はこれらが吸着子の秩序・無秩序転移であること、転移温度直上で発見されている特異な電子線散漫散乱が (1×1) 相の吸着子配置が (2×2) 構造の不規則多角形の領域に分かれることに由来すること、その構造が顕著な温度変化を示すこと等を理論模型についてのモンテカルロシミュレーション計算から結論した。また (2×2) 領域構造の出現機構の理論的説明を与えた。一方シリコンでは、低温側で (7×7) 構造をとるが、その際表面層の原子配列が大きく変化し単位胞の半分は積層欠陥となることが高柳氏の研究から知られている。坂本君は、積層欠陥のある場合および無い場合の両者の可能性を含む理論模型を提案し、シリコンおよびゲルマニウムの両者の表面再構成を統一的に記述することに成功した。前者は約 800°C で (1×1) 状態に転移するが、その際積層欠陥が消滅すること、前者のタイプの再構成から後者のタイプへの転移が相互作用パラメーターの変化で実現すること等重要な理論的予言ないし説明が得られている。

坂本君の研究は複雑な表面再構成の諸様相を、全温度領域および関連物質全般に渡って明快に説明する理論を与えたもので、表面再構成の問題における統計力学的研究の重要性を示す範例を与えたものである。結論として論文の内容は理学博士の学位論文として十分なものであると認める。