



Title	Theoretical Study on Electronic Structure of the Si (111) Di-mer-Adatom-Stacking-Fault Model
Author(s)	藤田, 真理
Citation	大阪大学, 1992, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/37930">https://hdl.handle.net/11094/37930</a>
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、<a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">大阪大学の博士論文について</a>をご参照ください。

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

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

The University of Osaka

氏 名	藤 田 真 理
博士の専攻分野の名称	博 士 (理 学)
学位記番号	第 1 0 2 8 8 号
学位授与年月日	平 成 4 年 3 月 25 日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 基礎工学研究科 物理系専攻
学 位 論 文 名	Theoretical Study on Electronic Structure of the Si (111) Dimer-Adatom-Stacking-Fault Model (Si (111) DAS 模型の電子構造の理論的研究)
論文審査委員	(主査) 教 授 張 紀久夫 (副査) 教 授 冷水 佐壽 教 授 菅 滋正 助教授 小林 融弘

### 論 文 内 容 の 要 旨

Dimer-Adatom-Stacking-fault (DAS) 模型は Si(111)  $7 \times 7$  再構成表面の原子構造模型である。この DAS 模型に対して、擬ポテンシャル法と局所密度汎関数法を用いて第一原理から電子構造の計算を行なった。表面系を取扱うために通常用いられる周期的スラブ構造を取入れることによって、平面波基底による展開が可能である。DAS 模型の特徴は以下の通りである。

- 1) 単位格子を2つの三角形の領域に分けると、その片方の表面第1層だけに stacking fault (積層欠陥) が存在する。
- 2) 積層欠陥が存在する領域 (F 領域) としない領域 (U 領域) の境界上の第2層原子は二量体 (dimer) 構造を作っている。
- 3) 2つの領域の境界の交点に corner hole 構造と呼ばれる原子空孔があり、交点上の第3層にある表面原子 (corner hole 原子) は表面に垂直な dangling bond (DB) を持つ。
- 4) 表面最外層には3つの第1層原子と結合するように Si 原子があり、これを adatom と呼ぶ。adatom も表面に垂直な DB を持ち、corner hole に隣接しているかないか、また U 領域にあるか F 領域にあるかで4種類に分類される。
- 5) 第1層に adatom と結合しない原子 (rest 原子) があり、やはり表面に垂直な DB を持つ。

計算の結果、DAS 模型に特徴的な原子軌道からできる表面状態及び共鳴状態がバルクの価電子帯及び禁止帯の全エネルギー領域に存在することがわかった。adatom とその下の3つの第1層原子及び1つの第2層原子に囲まれた領域に電子が集中している表面状態がバルクの価電子帯の下に得られる。adatom-第1層原子間及び Dimer 間の結合軌道の様にバルクの原子配列から少しゆがめられた軌道は

バルクの価電子帯の上端 (VBM) から約 1.5eV 低いエネルギー位置に共鳴状態として現れる。各 DB 軌道から構成される状態はバルクの禁止帯付近に得られる。

バルクの禁止帯付近の電子構造は走査型トンネル電子分光及び光電子放出の実験結果と比較される。バルクの禁止帯中に adatom の DB 軌道から構成される表面状態があり、フェルミ準位はこの状態の低エネルギー部分にある。4 種類の adatom のうちどの原子の軌道を多く含むかは占有状態と非占有状態でかなり異なっている。rest 原子及び corner hole 原子の DB 軌道は、VBM 付近に共鳴状態として得られる。理論的に得られた結果は実験結果と定性的に一致する。特に、adatom DB の占有状態は 4 種類の adatom のうち U 領域よりも F 領域の adatom DB 軌道、しかも corner hole に隣接した軌道を多く含む。この様子は走査型トンネル電子分光におけるフェルミ準位直下の 4 種類の adatom 位置の局所的な微分コンダクタンスの違いを良く説明する。ただし、定量的な一致のためには、理論的に得られたエネルギー値を、フェルミ準位から測定しておよそ 2 倍しなければならない。

本計算の精度は計算機的能力によって制限されている。また本計算で用いた局所密度汎関数法では自己エネルギーの効果が考慮されていない。前者を補強するために Si(111)  $1 \times 1$  表面を用いて同様の計算を行ない、平面波展開における cut-off 値に対する一電子エネルギーの依存性を調べた。その結果は  $7 \times 7$  DAS 模型に対して十分な cut-off 値で計算を行ったとき、Louie らによって議論されている自己エネルギーの効果と合わせて、エネルギー値が実験結果と定量的に一致する傾向を与えることがわかった。

得られた電子構造が、実験結果を良く説明することから、Si(111)  $7 \times 7$  表面の原子構造として、DAS 模型の正当性を理論的に支持する結論を得た。

## 論文審査の結果の要旨

本論文は、長い間謎とされてきた Si(111)  $7 \times 7$  再構成表面の原子配列の模型として最近提唱され次第に受け入れられつつある DAS モデルの電子構造を第一原理から計算し、実験と比較することによって、ミクロな電子論の立場からもこのモデルが支持されることを示したものである。計算は擬ポテンシャルと局所密度汎関数法を用いてセルフコンシステントに行い、表面電子系の固有エネルギーと固有関数を求めた。各エネルギー固有値に対する電荷分布の様子から、各固有状態が D (Dimer), A (Adatom), S (Stacking Fault) のどの部分から生じているかを明らかにした。特にバルクギャップ付近に現われる表面状態の性質を詳しく調べ、STM, STS, 光電子および逆光電子分光などの実験結果と比較して、各状態のエネルギー的な順序および電荷密度の特徴などがよく再現されていることを示した。

この数値計算はスーパーコンピュータの能力を限度一杯近くまで使っているが、表面単位胞のサイズからみると、将来はもっと多くの平面波基底をとって計算すべきと考えられる。その際予想される固有エネルギーのずれの符号と大きさを見積ると、(本論文では考慮されなかった) 自己エネルギー

ギー効果の寄与と合わせて、各固有状態のエネルギーはさらによく実験結果と対応するようになることを示した。

以上、数値計算上の多くの制約を乗り越えて行なわれた Si(111)  $7 \times 7$  表面の初めての計算で、種々の実験結果が半定量的に再現された本論文の内容は博士論文として価値あるものと認められる。