

5. Si(111) 7×7 表面構造の解析

東北大金研 井 野 正 三

Si の (111) 清浄表面には表面に特有な 7×7 構造が現れることが 1959 年に発見され、それ以来多くの構造模型が提出されているがいずれも観察事実を十分に説明できるものではない。著者らは RHEED (反射高速電子回折) の強度の詳細な解析をし、(h, k) ロッドの間に単純な規則性のあることを発見した。これを手掛りに平均の強度分布を求め、これを用いてパターン関数を計算した。このパターン図形を解析することにより 7×7 構造に対する新しい構造模型を導出した。この模型は、Si(111) 下地表面の原子間距離を a とするとき、一辺が $2a$ の正三角形状に異常散乱体が存在し、これが $7a$ の周期で 2 次元的に規則的に配列したものである。この異常散乱体として考えられるものは (1) 表面の空孔、(2) 吸着 Si 原子、(3) 原子変移などが考えられ、これらの構造は更にその多型も考えられるので合計 6 種類の構造が考えられる。これらのうちで最も可能性の高いと予想される空孔模型をとり上げ、空孔によってその周囲に生ずる原子変移を考慮し RHEED や LEED (低速電子回折) パターンに対応する回折強度を計算すると観察事実を非常に良く説明できることが明らかとなった。又この構造模型は RHEED・LEED の実験事実を良く説明するばかりでなく、反射電子顕微鏡による観察や UPS などによる電子分光的な実験事実ともむじゅんしないことが明らかとなった。

(1) 日本物理学会講演会予稿集, 1979 春, 大阪大 No. 2 p. 291.

(2) 日本物理学会講演会予稿集, 1979 秋, 愛媛大 No. 2 p. 297.