

性の乱れによるものと考えられる [実験の詳細については, 「2次元系の電子的性質国際会議報告」第2回 (Surf. Sci., vol 73, 1978), 第3回 (work book, 1979) を参照のこと]。より現実的な模型にもとづいた, 立入った計算が望まれる。

13. 半導体表面の電子状態に対する表面緩和効果

金沢工大 西田昌彦

共有結合型半導体の (111) 表面並びに III-V 族半導体の代表格である GaAs の (110) 表面は, 真空中で結晶を劈開することによって容易に得られるため, その電子状態は実験的且つ理論的にかなり良く調べられている。

一方, III-V 族半導体の (111) 表面については, それが劈開面でないため表面の作成が難しく, その電子構造に対する電子分光法的測定はほとんどなされていなかったが, 最近 Ar によるスパッタリングの方法や分子線気相成長法によって GaAs(111) 面の作成が容易となり, その電子状態も UPS によって調べられている¹⁾。

GaAs(111) 面は Ga のみからなる原子面と As のみからなる原子面とが $\langle 111 \rangle$ 方向に交互に配列しており, 従って, その (111) 表面原子層は Ga のみからなる (GaAs(111) Ga と名付ける) か或いは As のみからなる (GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$) As と呼ぶ) ということになる。すなわち, GaAs 単結晶の表側が Ga 面であるとすれば, その裏側は As 面である。このように, GaAs(111) 表面には二種類有り, GaAs(111) Ga と GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$) As に対する電子構造とそれに対する表面緩和効果には大変興味を持たれる。

本報告では, GaAs(111) 表面の電子構造に対する表面原子層の緩和効果について, 一電子近似の分子軌道法である拡張ヒュッケル法 (EHT) を用いて調べた結果を論ずる。バンドギャップ付近の特に大きい強度をもつ表面状態については既に報告してある²⁾。ここでは, weak resonance 並びにイオン性ギャップ付近の表面状態をも含めて論ずる。

調べる表面構造は, GaAs(111) Ga に対しては relax してない理想表面, 表面 Ga 原子層が $0.26 \text{ \AA}$ ばかり内側へ relax した表面, 及び完全に relax した表面 (Ga 原子

「固体表面及び吸着子の理論」研究会報告

層が第2原子層と一致した表面)であり、また、GaAs($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)As に対しては理想表面、表面As原子層が0.19Åばかり真空側へ expand した表面、及びAsとGaとの二重層間隔に等しい距離だけ expand (doubly expand) した表面である。ここで、0.26Åのrelaxationと0.19Åのexpansionとは、Paulingの共有結合に対するbond orderとbond lengthとの経験的な関係から見積った値に、GaAs結合のイオン性に対するわずかな補正を施したものである。また、Ga面が完全にrelaxした場合にはその幾何学的配置から、Gaのdangling-bondがpureな p_z でback-bondが sp^2 型混成となることが予想され、他方As面がdoubly expandすればback-bondはAsとGaとの p 軌道のみからなり、表面原子の s 電子はnonbonding的なlone pair characterを呈すると予想される。

以上のような表面緩和によるGa及びAs原子軌道の再混成(rehybridization)が表面電子構造に及ぼす効果を、表面バンドと電子状態密度について調べる。いずれの表面においてもdangling-bond並びにback-bondに付随した新しい表面状態が出現し、その特徴は上述のような表面の幾何学的構造による原子軌道のrehybridizationを良く反映している。計算によって得られた表面状態のエネルギー分布とUPSによる測定結果との比較も行う。

- 1) W. Ranke and K. Jacobi, Solid State Commun. 13, 705 (1973); Surf. Sci. 63, 33 (1977);
K. Jacobi, C. V. Muschwitz, and W. Ranke, Surf. Sci. 82, 270 (1979)
- 2) M. Nishida, Solid State Commun. 31, 513 (1979)

13. DV-X α 法による固体及び表面のバンド計算

分子研 里 子 允 敏

表面のバンド計算を行う方法として、バルクのバンドを再現するようなパラメータを用いたLCAO法がある。しかし、表面とバルクとで、同じパラメータを用いることは疑問がある。そのために、第一原理から表面のバンド計算を行う必要があろう。