

Si (110)-(16×2) のさまざまな安定表面構造

Various stable surface structures on the Si(110)- (16 × 2)

物材機構¹, 東芝 R&D センター², アスミス³, 東大生研⁴○山崎隆浩¹, 加藤弘一², 宇田毅³, 大野隆央^{1,4}NIMS¹, Toshiba R&D center², ASMS³, IIS Univ. Tokyo⁴○T. Yamasaki¹, K. Kato², T. Uda³ and T. Ohno^{1,4}

E-mail: YAMASAKI.Takahiro@nims.go.jp

Si(110)表面は、高性能 p-FET への適用などから Si(100)表面とともに重要性を増しつつある表面である。清浄 Si(110)表面は、1200℃に加熱した後 16×2 の再配列構造をとり、規則的に並ぶ単原子高さの凹凸ステップ構造上にステップと平行に走るジグザグ鎖構造の STM 像が観測される。各ジグザグ鎖は五員環の対に分解される。われわれは第一原理分子動力学法プログラム PHASE を用いて網羅的探索を行い、これまで提案されてきた構造のどれよりも (16×2 格子あたり 5.0 eV 以上) 安定で、かつ STM 像をよく再現するステップ表面構造を発見し、前回発表した[1]。上下テラスには、バックリングした四量体、七員環、四員環が形成されている。

今回、このステップ構造とエネルギー的にはほぼ縮退したステップ表面構造が複数存在すること、小さな原子変異によりこれらの表面構造間の遷移が可能なこと、バックリングした四量体の位相反転だけでなく、これらの複数表面構造の時間的平均として STM 像が観測されている可能性について詳しく説明する。計算には 10 層の Si からなるスラブ構造をつくりそれと同じ厚さの真空層を重ね、構造緩和を行った。スラブ裏面は H で終端し固定している。どの表面構造もバックリングしている四量体の位置は共通であるが、七員環、四員環の位置は異なっている (図)。

さらに、四量体、六員環、四員環により平坦な表面を覆い尽くすことにより、ステップ構造と同程度の安定な表面を作ることにも可能である。この表面構造についても詳しく説明する。

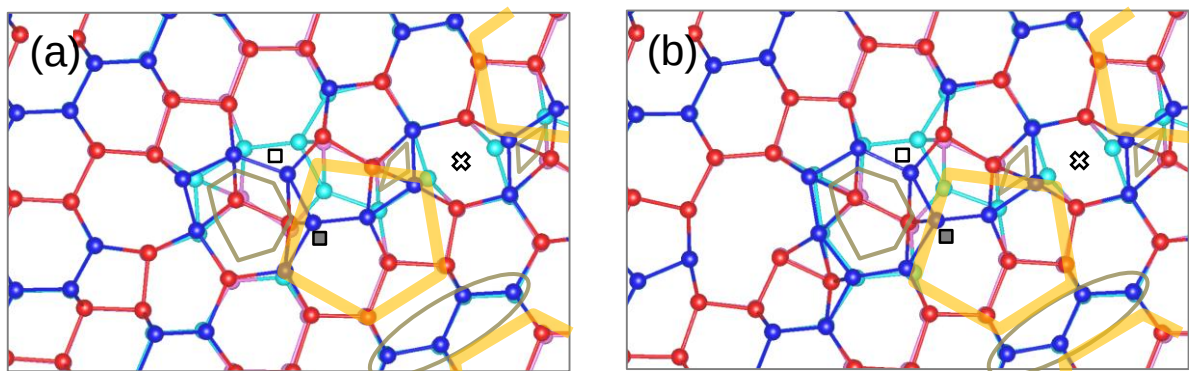


図. Si(110)-(16×2)平坦表面に形成した安定構造。(a)、(b)いずれも四量体、七員環、四員環を持っている。水色と青色の球は一層目、赤色の球は二層目の Si 原子を表す。水色で表した原子位置は、前回発表したステップ構造を構成する上下テラスのものであった (下テラスが(b)、上テラスが(a))。□および■で示された原子を移動することで別の表面構造を作ることができる。

本研究は、文科省「イノベーション基盤ソフトウェアの研究開発」プロジェクトにより行ったもので、計算は JAMSTEC の地球シミュレータを用いて行った。

[1]山崎, 加藤, 宇田, 大野, 第 60 回応用物理学会春季学術講演会 (2013) 28p-G8-1.