

STM 測定と第一原理計算による GaAs-c(4×4) α , β の電子構造解析

Electronic structure analysis of GaAs-c(4×4) by STM and First Principle Calculation

東工大院理工¹, 電通大先端理工² ○加来 滋¹, 中村 淳², 柳生 数馬¹, 吉野 淳二¹Tokyo Tech.¹, UEC-Tokyo² ○Shigeru Kaku¹, Jun Nakamura², Kazuma Yagyu¹ and Junji Yoshino¹

E-mail: kaku@ss.phys.titech.ac.jp

はじめに : GaAs(001)-c(4×4) α と β 構造は、As-rich な再構成構造として知られ、 α 構造は Ga-As ダイマーで、 β 構造は As-As ダイマーでそれぞれ終端される[1]。ところが、 α 構造は Ga-As ダイマーからなる非対称構造にも関わらず、STM(走査トンネル顕微鏡)の empty-state(正 Sample Bias)像は対称像となる[2]。この非対称な原子配列構造と対称な STM 像の不一致の原因は必ずしも自明ではない。本報告では第一原理計算と構造最適化により得られた c(4×4) α の状態密度分布を調べ、その起源を解析した。

実験 : GaAs(001)-c(4×4) α は、基板温度 650℃で酸化膜除去後、クラッキングしていない As₄ 雰囲気(As₄/Ga>100)のもと、基板温度 600℃でバッファ層を成長し、78K で測定した。

計算方法 : ダイマー層-As-Ga-...-Ga-As-H 終端層からなる 11 層に真空層を加えた超格子において、第一原理計算により全エネルギー計算を行って構造を最適化した後、状態密度分布図を作製した。さらに、Tersoff-Hamann[3]の方法を用いて STM-simulation を行った。

結果 : STM 測定画像(図 1(a))と同様、STM-simulation 像(図 1(b))でも、c(4×4)- α の empty-state がほぼ対称な像となる結果が得られた。また、図 1(b)の点線に沿った断面の状態密度分布(図 1(c))に注目し、水素様原子波動関数の分子軌道を参考にして、対称な STM 像の起源となる軌道を調べた。その結果、Ga-As ダイマーの Ga の p_z 軌道および、As と Back-side As との反結合軌道が主な起源であることが分かった。また、As が Ga よりも真空側に突き出すため、等状態密度(トンネル電流)面を結ぶと結果的にほぼ同じ高さ、即ち対称となることが分かった。発表では、 α 構造の filled-state や β 構造の結果も報告する。

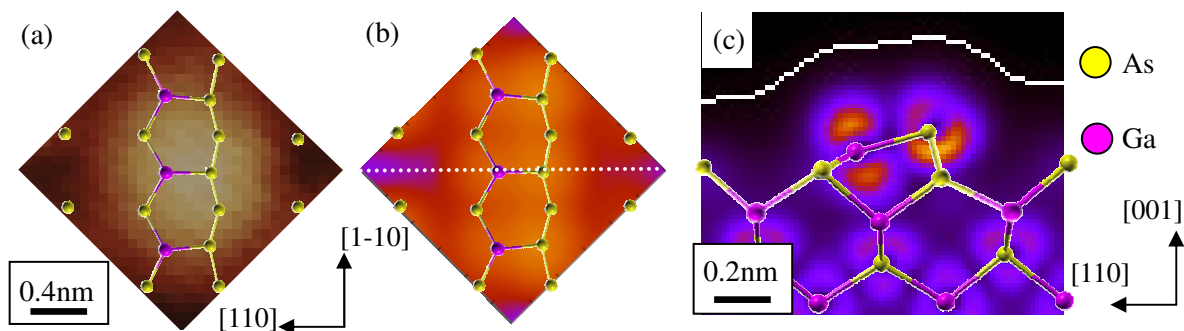


図 1 : (a)c(4×4)- α 構造の empty-state(Sample Bias +3V)の STM 測定画像。(b)第一原理計算で構造最適化した c(4×4)- α 構造の STM-Simulation 像(Sample Bias +3V)。(c) (b)中の点線に沿った断面図の状態密度分布。白い実線は仮想 STM 探針がなぞった等状態密度(トンネル電流)面で、その高低情報をカラーマップで表すと(b)の STM-Simulation 像となる。

[1] A. Ohtake et al., Phys. Rev. Lett. **89**, 206102 (2002). [2] K. Yagyu et al., J. Vac. Sci. Technol. A **30**, 061403 (2012). [3] J. Tersoff and D. R. Hamann, Phys. Rev. B **31**, 805 (1985).