

## 4D12

### Si、Ge(111)-2×1 表面のステップ構造および バイアス依存型 STM 像の電子状態計算

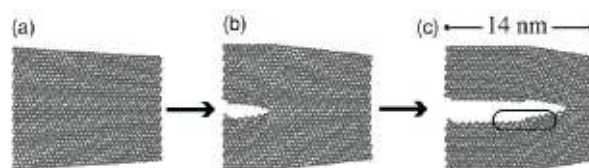
(鳥取大院・工<sup>1</sup>, JST-CREST<sup>2</sup>) ○谷川 雅一<sup>1</sup>, 小田 泰丈<sup>1</sup>, 星 健夫<sup>1,2</sup>, 石井 晃<sup>1</sup>

#### 【序】

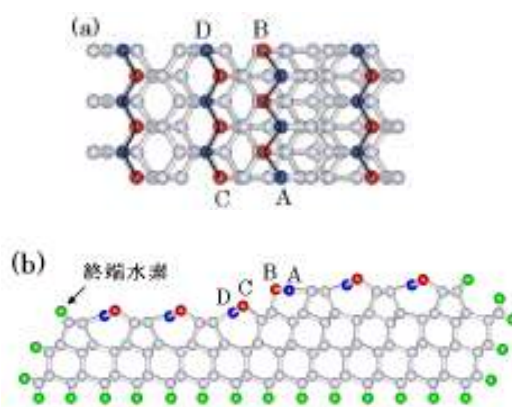
近年開発された超大規模電子構造計算[1] (タイトバインディング型ハミルトニアンを用いたオーダー-N 計算法) により、Si(111)単結晶のへき開で形成されるステップ構造が予言された[1] (図[1])。一方、へき開によって現れる Si(111)-2×1 平坦表面がバイアスに依存した STM 像をもつことは古くから知られており、それは実験からも確認されている[2]。Si(111)-2×1 表面のステップ構造は STM 実験では得られている (論文[1]の文献を参照) ものの、原子構造の特定には至っていない。そこで、本研究では、ステップエッジ近傍付近に相当する系に対し、第一原理計算 (密度汎関数理論・平面波基底) をもちいて、ステップエッジ部分の原子構造決定およびバイアス依存型 STM 像を示した。また、Ge(111)-2×1 表面のステップ構造についても同様の結果が得られた。

#### 【計算】

計算は Si(111)-2×1 表面のステップ構造について密度汎関数理論、平面波基底を用いた第一原理分子動力学 (プログラムパッケージ「VASP」) によって計算した。2つの (準) 安定構造を見つけた上で、それぞれにたいして、局所状態密度 (LDOS)、バイアス依存を示す STM 像を計算した。Ge(111)-2×1 表面のステップ構造についても同様に計算した。k 点は 1×6×1 でサンプリングし、カットオフエネルギーは 400eV、奥行き方向にのみ周期性を与え、Si 原子 96 原子、H 原子は 21 原子でステップ構造を構成している (図[2]の構造は第一原理分子動力学計算で得られた安定構造)。



図[1]: 大規模電子構造計算による、Si(111)単結晶のへき開プロセス[1]。



図[2]: 平面波基底第一原理分子動力学計算による Si(111)-2×1 表面のステップ構造。(a)はステップエッジ周辺の top view、(b)は side view。

### 【結果と考察】

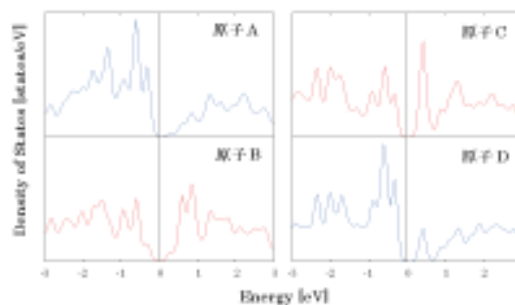
図[2]に、安定構造を示した。7員環と5員環が、 $2 \times 1$ 構造の基本単位となる。ステップエッジ(原子A,Bを含む部分)には、6員環が現れる。なお計算では、ステップエッジ部分(原子A、B)が逆にチルトした、準安定構造も得られており、エネルギーは安定構造より $\Delta E=0.19\text{eV}$ (単位構造あたり)だけ高い。以下では安定構造(図[2])についてのみ述べる。

表面原子A~Dについて、それぞれの局所状態密度計算を行った結果を図[3]に示す。ステップエッジの原子A、原子Bに注目するとフェルミエネルギー( $E_F=0.0\text{eV}$ )の挟んで正負のエネルギー領域で異なる原子の状態のピークが確認できる。

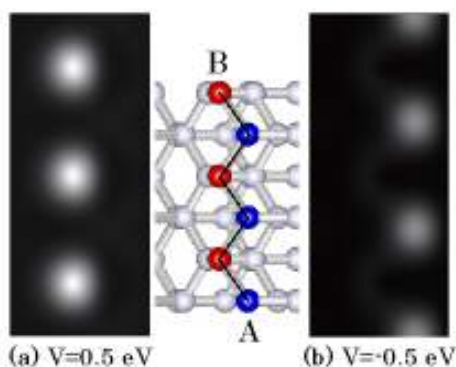
波動関数の広がりから、実験で得られるべきSTM像を図[4]に示す。この図[4]は正負のバイアスを設定しており、バイアスの違いによってSTM像で光る原子が異なっていることがわかる。

同様の結果が、Ge(111)- $2 \times 1$ 表面についても得られた。

本研究は理論からの予言として、STM像解析に重要な知見を与えており、超大規模電子構造計算と平面基底第一原理計算を組み合わせた階層的理論アプローチの一般的有用性を示している。



図[3]: ステップエッジの原子の局所状態密度。表面原子A~Dは図[2]で示した原子に対応しており、フェルミエネルギー $E_F$ は $E_F=0.0\text{eV}$ に設定している。



図[4]: バイアス依存型STM像。バイアス電圧は(a)が $V=0.5\text{eV}$ 、(b)が $V=-0.5\text{eV}$ で(a)では原子Bが、(b)では原子Aが光っている。

### References

- [1] T. Hoshi, Y. Iguchi, and T. Fujiwara, Phys. Rev. B72, 075323 (2005); 星健夫・藤原毅夫, 日本物理学会誌, 2006年4月号, pp.256-259; <http://www.elses.jp>
- [2] J. A. Stroscio, R. M. Feenstra, and A. P. Fein, PRL 57, 2579 (1986)