

# Si(100)表面構造の揺らぎと位相欠陥のダイナミクス

重川秀実

筑波大学物質工学系、CREST

Si(100)表面では、ダイマー相互間のバックリングの位相により $c(4 \times 2)$ 及び $p(2 \times 2)$ の二つの再構成構造が存在し、実験的 ( $\sim 100$  K) には、 $c(4 \times 2)$ 再構成がSi(001)表面の基底状態であるとされている。しかし、6 K辺りの低温において、表面超構造が $c(4 \times 2)$ 及び $p(2 \times 2)$ の二つの相の間で大きく揺らぐ様子がSTMにより観察された[1]。6 Kにおける表面での構造変化は、ダイマー列内に存在するバックリングの位相欠陥 (P欠陥) の位置的な揺らぎにより引き起こされる。P欠陥は二つの隣り合うダイマーが同じ側にバックルした構造を持ち、C欠陥と同様にその両側でダイマーのバックリングの位相をずらす。従って、P欠陥が存在するとその片側で、隣り合うダイマー列との間の構造が $c(4 \times 2)$ 及び $p(2 \times 2)$ の間で変化することになる。しかも、P欠陥はダイマー列内を移動することが可能で、これにより二つの相間での構造変化が生じる。P欠陥の移動は、孤立した位相欠陥の移動を意味し、一種のフェイゾ的な振り舞いを示すといえる。

6 KではP欠陥の移動がかなり自由に生じ、 $p(2 \times 2)$ 領域が $c(4 \times 2)$ 領域とほぼ同等の割合で現れる。また、時間と共に、両領域の間で構造が大きく変化するのが観察される。一方、80 Kでは、 $c(4 \times 2)$ 構造が一面を覆う。しかし、注意深く観察すると、80 KでもP欠陥が存在し、表面を激しく移動しているのが見られる [2]。P欠陥の存在にも関わらず、6 Kでの結果とは異なり表面が見かけ上 $c(4 \times 2)$ 構造を保つのは、隣り合うダイマー列上のP欠陥が対を作り、完全な $p(2 \times 2)$ 構造が取り除かれていることによる。

隣り合うダイマー列上のP欠陥が対を形成すると、 $c(4 \times 2)$ と $p(2 \times 2)$ 構造の境界が形成されることになる。イジングスピンモデルを用いた解析によると、 $c(4 \times 2)$ 、 $p(2 \times 2)$ 領域、及び境界上にあるダイマーのエネルギーの関係は、 $E(c(4 \times 2)) < E(\text{境界}) < E(p(2 \times 2))$ となる。従って、80 Kでは、完全な $p(2 \times 2)$ 構造を取る領域を減少させ、境界の構造を形成することにより、表面構造を安定化していると考えられる。また、同結果は、80 Kでは完全な $p(2 \times 2)$ 配列は不安定であるが、相境界の構造としては充分安定に存在できる温度領域となっていることを示している。これは、C欠陥の片側で $p(2 \times 2)$ 構造が不安定になり対称ダイマーとなる140 Kでの結果や [3]、 $c(4 \times 2)$ ドメインの境界構造が安定して存在するのが観察された120 Kでの結果 [4] と一致する。いずれにせよ、80 Kでは列間相互作用がかなり強く、 $c(4 \times 2)$ と $p(2 \times 2)$ 構造の配列のエネルギー差がP欠陥のダイナミクスを通じて表面構造の安定性に大きく関わっている。P欠陥が移動すると、 $(c(4 \times 2)$ 、 $p(2 \times 2)$ 構造の間の面積が変化することになるが、二つの相の境界ではP欠陥が移動しても全体としては両相の面積が変化しない。従って、境界上ではP欠陥の移動が容易で、列間相互作用の大きい $\sim 100$  Kでは、P欠陥のダイナミクスにおいて相境界が重要な役割を果たすことが考えられる。

P欠陥は位相欠陥であり、(1) C欠陥の片側にC欠陥と対をなして存在すると考えられるもの他に、(2) 孤立した状態で欠陥やステップから導入されたり、また、(3) ペアで生成することにより表面に導入されると考えられ、実際にSTMにより観察されている [5]。

Si(100)表面では対称ダイマーの領域が存在する。光電子分光の結果は、ダイマー列に沿って、反強磁性的な、互いにバックリングの向きが交互に逆転した構造を取るとして計算したバンド構造に一致する。また、LEEDの結果も、ダイマー列に沿った構造の秩序は常温近辺でもかなり保たれていることを示している。一方、P欠陥の速い移動によりダイマー列がSTMで対象ダイマーとして観察されると考えると、ダイマー列の多くの領域は反強磁性的な構造を保ち、ダイマー列に沿っては常温近辺でも反強磁性的な構造を取るとする光電子分光やLEEDの結果とも一致することになる。また、80 Kでの結果で見られた様に、高い温度領域では隣り合うダイマー列間の相互作用は強く、ある列の上の一つのP欠陥の移動が隣の列のP欠陥を次々に誘起し、広い領域の対象ダイマーを引き起こす事も考えられる。従って、対称ダイマーの構造もP欠陥のダイナミクスにより説明される可能性が高い [6]。低温における対称ダイマーの揺らぎや欠陥の表面構造への影響などについても紹介する予定である。

## 参考文献

- [1] H. Shigekawa, et al., J. Jpn. Appl. Phys. 35, 8B (1996) L1081.
- [2] H. Shigekawa, K. Miyake, M. Ishida, K. Hata J. Jpn. Appl. Phys. 36, 3A (1997) L294.
- [3] H. Tochiyama, T. Amakusa, and M. Iwatsuki, Phys. Rev. B, 50, 16 (1994) 12262.
- [4] R. Wolkow, Phys. Rev. Lett., 68, 17 (1992) 2636.
- [5] 重川秀実、他、表面科学、18巻 (1997) 780.
- [6] H. Shigekawa, K. Hata, K. Miyake, M. Ishida, S. Ozawa, Phys. Rev. B 55 (1997) 15448