

最新表面科学講座 (第III講)

J. Jpn. Soc. Colour Mater., 85 [10], 427-434 (2012)

固体表面の電子状態

平山博之*[†]・中辻 寛*

*東京工業大学大学院総合理工学研究科材料物理科学専攻 神奈川県横浜市緑区長津田4259 J1-3 (〒226-8502)

[†]Corresponding Author, E-mail: hirayama.h.aa@m.titech.ac.jp

(2012年6月29日受付; 2012年7月24日受理)

要 旨

固体表面は、固体内部の原子が詰まった空間が、その外側の原子がまったく存在しない空間（真空）と接する場とみなせる。このためたとえば半導体のような固体では、半導体内部において個々の原子を隣接原子と結び付けている化学結合手は、半導体表面では結合相手がないままの状態では放置された特殊な状況が発生する。また、金属などの固体内部では、価電子は三次元方向に自由に運動できる。しかしその表面においては、電子は表面を超えて固体の外側に出ていくことができないため、運動できる空間に制約が生じる。本稿では、こうした固体表面に特有な状況によって生み出される、表面に局在した特徴的な電子状態について解説する。

キーワード：固体表面、表面電子状態、ダングリングボンド準位、ショックレー準位

1. 緒 言

本稿では固体表面に局在する形であられる表面に特徴的な電子状態、すなわち表面電子状態について解説する。固体表面では、原子はその外側に隣接する原子が存在しない。このため、固体を構成する原子同士が化学結合によって結ばれている半導体のような物質では、Fig. 1 (a) に示すように、その表面においては原子から固体の外側に向かって伸びる化学結合手は結合相手をもたない、“ダングリングボンド”と呼ばれる特殊な状態に置かれる。また固体内部を価電子が自由に運動している金属のような物質においても、Fig. 1 (b) に示すように、電子は固体表面においてはその外側への運動を制限された状況が実現される。こうした固体表面に特有な事情のため、固体表面では固体内部とは非常に異なる特殊な電子状態が表面に局在する形であられる。こうした表面に局在する電子状態は一般に“表面電子状態”と呼ばれる。

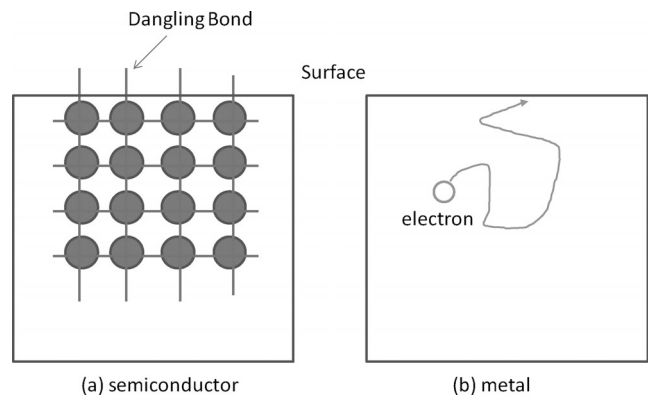


Fig. 1 Surfaces of (a) semiconductor and (b) metal.

以下では、この表面電子状態の成因と特徴を典型的な半導体であるシリコン (Si) の (001) 表面、および典型的な金属である銀 (Ag) の (111) 表面を例に取り上げ、具体的に解説する。

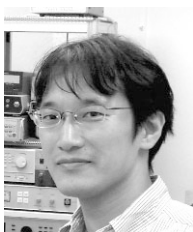
2. 半導体表面にあられる電子状態

シリコンやゲルマニウムのような半導体結晶中では、Fig. 2 に示すように固体中で各原子はその四方に伸びた sp^3 混成軌道により互いに結合して安定構造を実現していることはよく知られている。しかし固体表面の原子には、その外側に隣接する原子が存在しない。このダングリングボンドの存在のために、半導体表面は以下に述べるように、固体内部のバンドギャップの中に、表面に局在した電子準位をもつこととなる。

固体表面の電子状態を考える前に、半導体内部の電子状態の成り立ちを見ておこう。先にも述べたとおり、固体内部の原子はその周囲に必ず隣接原子が存在し、その間は化学結合 (sp^3 混成軌道) によって結ばれている。このため、固体中の隣り合った任意の2個の原子を切り出して眺めれば、それぞれの原子が sp^3 混成軌道によってつながった2原子分子と捉えることがで



〔氏名〕 ひらやま ひろゆき
〔現職〕 東京工業大学大学院総合理工学研究科材料物理科学専攻教授
〔趣味〕 ジャズ&ボサノバギター
〔経歴〕 1986年東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻博士課程修了。同年㈱日本電気入社。1990～1991年マックスプランク財団フリッツ・ハーバー研究所客員研究員。1996年東京工業大学助教授。2007年同教授。



〔氏名〕 なかつじ かん
〔現職〕 東京工業大学大学院総合理工学研究科材料物理科学専攻准教授
〔趣味〕 音楽鑑賞
〔経歴〕 1998年大阪大学大学院基礎工学研究科物理系専攻博士後期課程修了。同年科学技術振興機構博士研究員を経て、東京大学物性研究所助手(助教)。2012年より現職。