

Si (111) 基板上に作製した In 超薄膜の量子井戸状態

Quantum-well states in ultrathin In films on Si(111)

京大院理 °八田 振一郎, 山下 真広, 奥山 弘

Kyoto Univ. °Shinichiro Hatta, Mahiro Yamashita, Hiroshi Okuyama

E-mail: hatta@kuchem.kyoto-u.ac.jp

半導体基板上的金属薄膜は、金属/半導体界面の物性を精密に理解するテンプレートとしてよく研究されてきた。また、半導体基板にはバンドギャップがあるため、金属薄膜の電子状態に強い閉じ込め効果が働くことでも注目されてきた。代表的な半導体である Si 表面上では、Ag や Pb の超薄膜における量子井戸状態 (QWS) が形成され、層数ごとの安定性とその影響を受けることにより、均一な原子層数の膜の形成が促される *electronic growth* という現象も見つかっている[1]。このような膜形成は、金属原子の拡散が抑制される低温環境を必要とする。我々のグループでは、Si(111)基板上の In 薄膜の作製において、100 K 程度の低温を維持することで、原子層単位で膜厚制御可能であることを最近報告した[2]。このようにして作製した In 薄膜の電子構造と In/Si 界面の影響について角度分解光電子分光法 (ARPES) を用いた研究を行った。

試料である In 薄膜は、分子線エピタキシー (MBE) 法を用いて作製した。始めに Si(111)表面を 1320 K のアニールによって清浄化し、次に 2 原子層で構成される In/Si(111)-(√7×√3)超構造を In の蒸着と約 670 K の加熱によって作製した。その後 100 K まで冷却してから、追加の蒸着を行った。4 原子層以上の膜厚において(√3×√3)の超格子をもつ薄膜が形成され、格子サイズから面心立方型の(111)に類似した原子配列が積層していることが示唆された。バルク In の sp バンドに由来する QWS は、6 原子層以上で明瞭に観測された。この QWS は 3.2 eV からフェルミ準位の間で観測され、そのエネルギーの範囲は fcc 構造を仮定して行ったバンド計算から予想されるより高束縛エネルギーに広がっていることが分かった。QWS のエネルギーの原子層数による変化は、薄膜内と表面/界面における位相シフトを用いた位相シフト量子化則 (PSQ 則) によってよく再現された。この QWS の他、0.5 eV 付近に Si のホールバンドによく似た分散をもつ QWS も見つかった。この QWS は 10 原子層を超えても観察される一方、そのエネルギーは In の膜厚によってシフトしていることが分かった。ホールバンドの QWS は、n 型 Si が金属と接することによるバンドベンディングが起源であるが[3]、金属側は単原子層レベルでも十分に状態密度が大きいため、バンドベンディングが膜厚の影響を受けるとは考えにくい。そこで、In/Si 界面を透過する波動関数を仮定して PSQ 則を適用する解析を試みた。講演では In/Si 界面を透過するときの位相シフトの導入が、実験結果の再現に重要であるとする結果について詳しく説明する。

[1] Z. Zhang, Q. Niu, and C. K. Shih, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5381 (1998).

[2] S. Hatta *et al.*, *Phys. Rev. B* **108**, 045427 (2023); K. Kuroishi *et al.*, *Phys. Rev. B* **109**, 235410 (2024).

[3] S. N. Takeda, N. Higashi, and H. Daimon, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 037401 (2005).