

## 極性 ZnO 表面の電子構造

小澤健一<sup>1)</sup>, 大場由香子<sup>2)</sup>, 枝元一之<sup>2)</sup>, 東口光晴<sup>3)</sup>, 三浦雄一<sup>3)</sup>, 田中克昇<sup>3)</sup>,  
島田賢也<sup>4)</sup>, 生田目博文<sup>4)</sup>, 谷口雅樹<sup>3,4)</sup>

<sup>1)</sup>東工大院理工, <sup>2)</sup>立教大理, <sup>3)</sup>広島大院理, <sup>4)</sup>広島大 HiSOR

ウルツ鉱型結晶構造を持つ酸化亜鉛(ZnO)を  $c$  軸に沿って劈開すると, 劈開面の一方は  $\text{Zn}^{\delta+}$  イオンで, もう一方は  $\text{O}^{\delta-}$  イオンで終端された電氣的極性表面が得られる。このような極性表面は本質的に不安定であるため再構成を引き起こしやすいが, ZnO 極性面は(1×1)構造を保つことが知られている。これまでの STM の観測から, 両極性面の表面構造は大きく異なることが明らかにされた[1]。これによると, Zn 極性面は三角形のピットやアイランドが数多く形成され, ステップ密度が非常に高くなっているが, O 極性面は幅広いテラスが表面を覆っており, ステップ密度が低いという特徴がある。Zn 極性面でのステップの形成は  $\text{O}^{\delta-}$  イオンを表面に露出させ,  $\text{Zn}^{\delta+}$  イオンによる表面電荷を補償して安定化するためだと考えられている[2]。一方, O 極性面の安定化の仕組みはいまだ明らかにされていない。

我々は, O 極性面の安定化機構を明らかにする研究の一環として, まず O 極性面の表面電子構造を角度分解光電子分光法(ARPES)によって明らかにした。ARPES 測定は広島大学放射光科学研究センター(HiSOR)の BL-1C で, Scienta SES200 電子エネルギー分析器を備えた ARPES 装置を用いて行った。Fig. 1 は, O 極性面における表面局在準位のバンド構造を示したものである。明るいところが表面準位に対応しているが, ZnO 価電子帯の浅い領域に(1×1)分散を持つバンドを形成していることが分かる。これは, O 極性面に存在すると予想されていた O 2p ダングリングバンド準位(図中の点線が理論計算[3, 4]で求められたバンド)に対応することが, そのエネルギー位置から分かる。定性的には実験バンドと理論バンドは, 同様の分散構造を持つという点で大まかには一致している。しかし詳細はかなり異なっている。この違いを埋めることが表面安定化機構を明らかにする鍵になるかもしれない。

二つの ZnO 極性面は, 上で述べたように表面構造が大きく異なっている。このような表面構造の違いは, バルク構造がたとえ同じでも表面近傍の電子状態に少なからぬ影響を及ぼすと予想される。今回の研究から, 極性面に依存したバルクの電子状態の違いを初めて見出した。これについての詳細は, 当日のポスターセッションで紹介する。

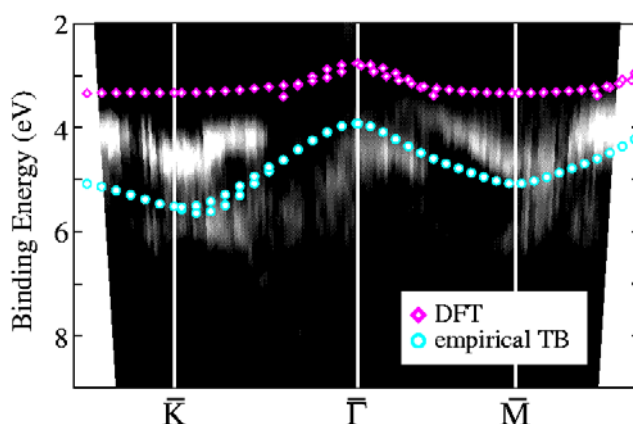


Fig. 1 Intensity plot of the surface-localized states. The bright areas correspond to the high spectral weight of the surface-localized states. Lines plotted by open symbols are the theoretically derived O 2p dangling-bond bands.

- [1] O. Dulub et al., *Surf. Sci.* **519** (2002) 201. [2] O Dulub et al., *Phys. Rev. Lett.* **90** (2003) 016102.  
[3] I. Ivanov et al., *Phys. Rev. B* **24** (1981) 7275. [4] G. Kresse et al., *Phys. Rev. B* **68** (2003) 245409.