

卷頭言

ステップの功罪

村田好正



単結晶の表面を扱う場合、ステップはつきものである。特に真空中で開いた表面には高い密度でステップが生じる。ステップを意識的に作った微斜面では、ステップが規則的に配列することがある。さらにステップの特性を利用して、規則的に配列した量子ドットを作る試みがある。また金属表面ではステップに固有な電子構造が観測される。そして金属の触媒作用での表面欠陥の影響を調べるために、以前には超高真空下で表面欠陥を直接観測する手段がなかったため、LEED パターンで観測できるステップが規則的に配列した表面が用いられた。一方、Si(001) では [110] と [1\bar{1}0] 方向でのステップの安定性の違いを利用して、 1×2 構造がない 2×1 構造のみの表面を作ることができる。結晶成長や表面反応では表面拡散が重要な役割を果たすが、表面拡散する際のエネルギー障壁の高さがステップとテラスで大きく異なるため、エピタキシーでステップが関係し、触媒作用でもステップの効果が現れるのは当然である。これに関連しては、原子が自己拡散でステップを横切るとき、ステップを乗り越えるより、入れ替わる拡散の方がエネルギー障壁が低くなる現象がある。

このようにステップが表面現象、特に表面の動的過程では深くかかわってくる。しかし表面相転移では、協力現象を阻害するために、ステップがわざをする。Si(001)c(4×2) ⇌ 2×1 の秩序・無秩序転移では、イジング模型のオンサガーの関係式からの外れが観測されるが、それは転移を起こす領域の広さが有限であることに起因している。Si(111) では、へき開面の準安定な 2×1 表面から安定相の 7×7 表面への非可逆な相転移の転移温度はステップ密度に依存し、ステップ密度が低いと転移温度も低くなる。この相転移のプロセスは解明されていないが、 2×1 表面のπ結合鎖模型から 7×7 表面の DAS 模型への大きな構造変化がなぜ 210°C という低い温度で起きるかは大きな疑問である。へき開面のステップ密度が高いことが実験の立場からこの疑問を解くのを阻害しているといえよう。

金属に目を向けると、たとえば Pt(001) では、準安定相の 1×1 表面は 5×20 の安定相表面の吸着誘起相転移を利用して作製するが、 1×1 表面の表面原子密度が小さくなるためにステップを生じる。このステップが吸着分子の非熱的過程による脱離では現象を複雑にし、脱離機構の解明を阻害する。また筆者らは相転移を利用して高品質の酸化物の单結晶薄膜を金属单結晶表面上に作製しているが、そこでは基板表面のミスカットを 0.1°C 以下にして、ステップ密度を減らすことが望ましい。他方絶縁体結晶表面では、ステップ密度を減らすと LEED、電子分光測定での帶電の影響が軽減でき、これは絶縁体結晶表面の研究の推進に寄与するであろう。表面科学にとってのステップの重要さは本特集号の記事に譲り、逆にステップ密度を減らした表面を作ると、新しい表面科学、固体物理が生まれる可能性があることを述べた。

(電気通信大学物理)