

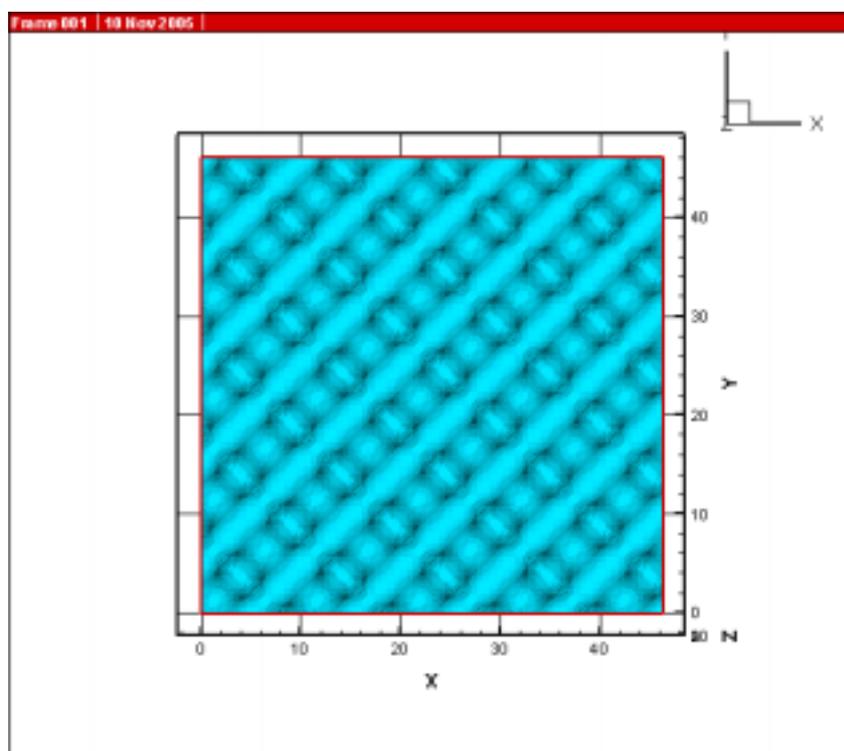
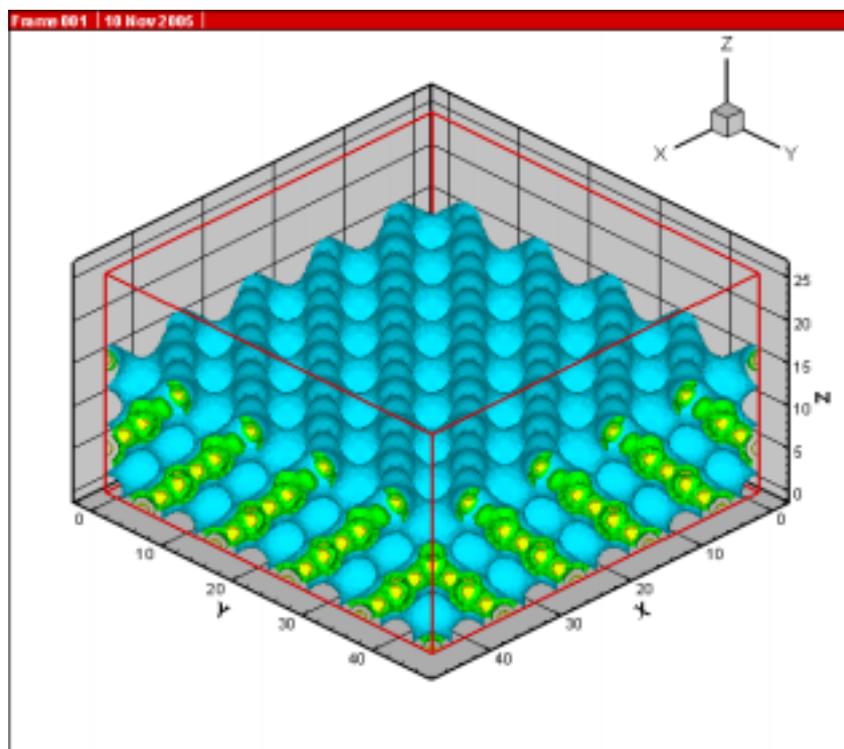
STM sample の説明

これらは半導体表面の電子状態密度を計算したもの。STM の測定結果を正確に評価するためには、表面における定量的で精度の高い電子状態計算を実行する必要がある。さらに発展させ、STM の測定結果と相補的に表面の構造、電子特性等を評価するために役立てたい。

以下 Si(110)_H は水素終端 Si(110)表面を、Si(111)_H は水素終端 Si(111)表面を表す。

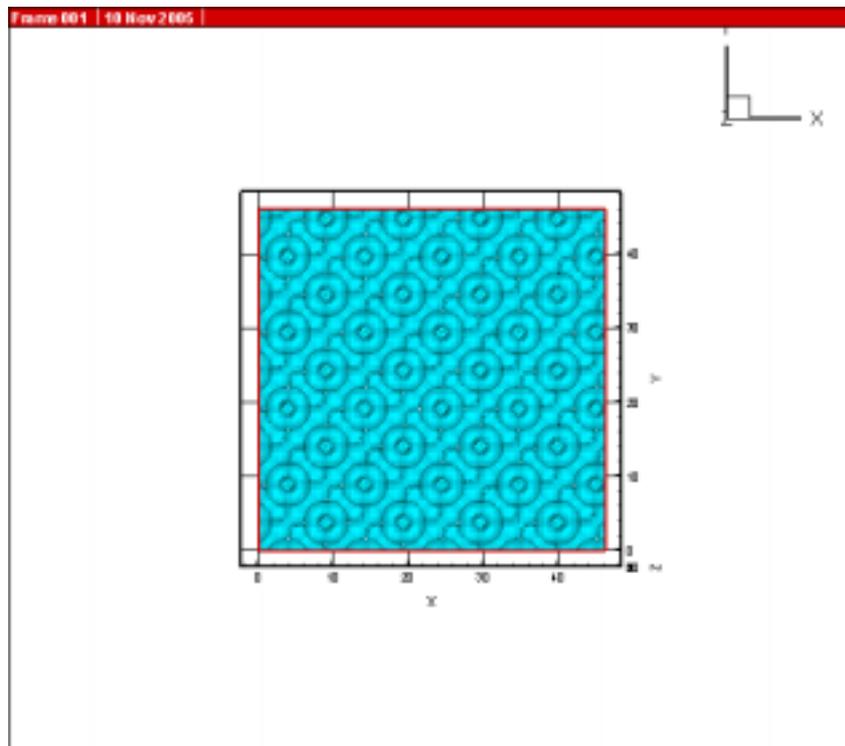
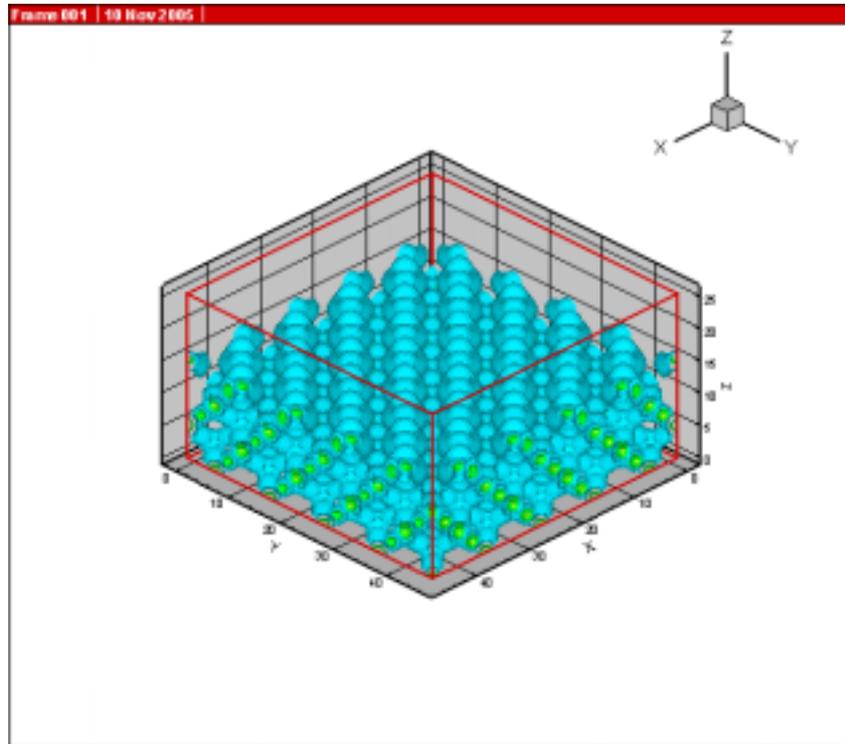
Si(100)_H 電子密度

Si(100)表面を水素終端させた表面の電子状態密度。表面における reconstruction は考慮していない。電子が表面から空間へしみ出す様子を定量的に計算している。



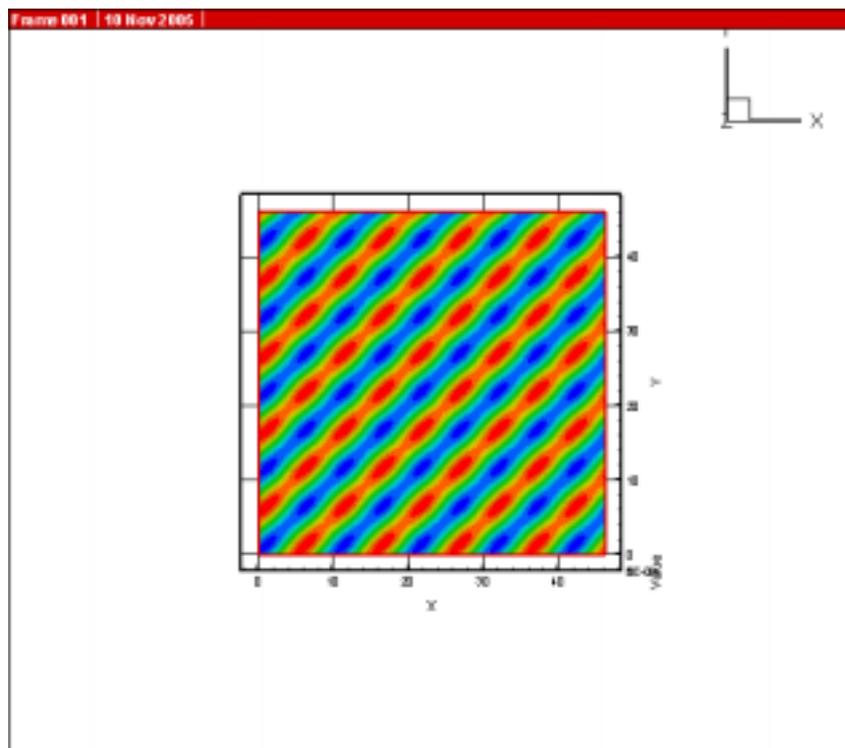
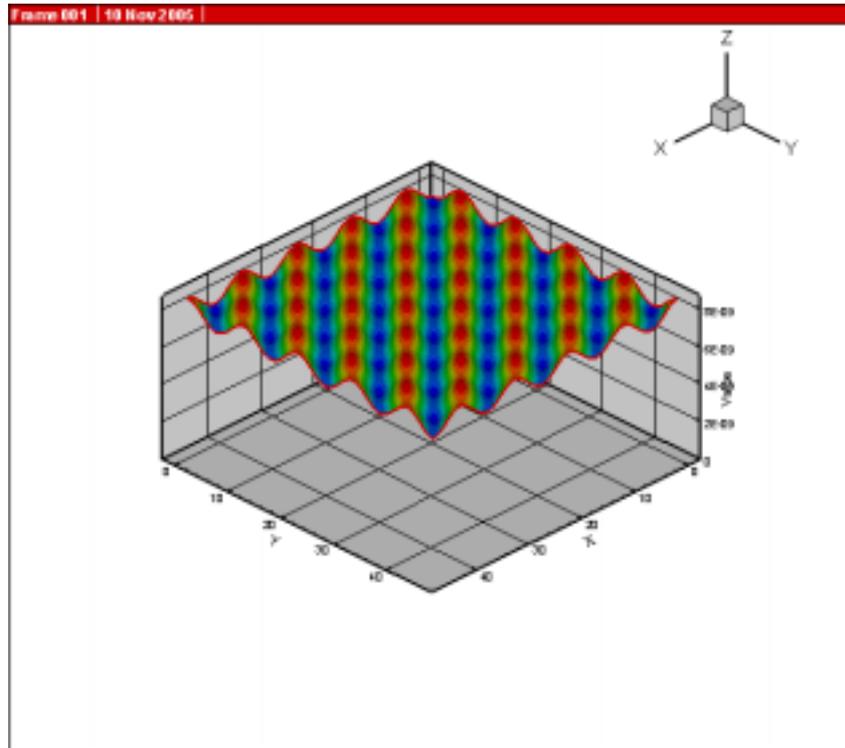
Si(100)_H VBM 電子状態密度

Si(100)表面を水素終端させた表面の Valence band maximum 近傍の電子状態密度。Fermi エネルギーから、その下方 2.0eV までの電子状態密度を足し合わせたものを表示している。



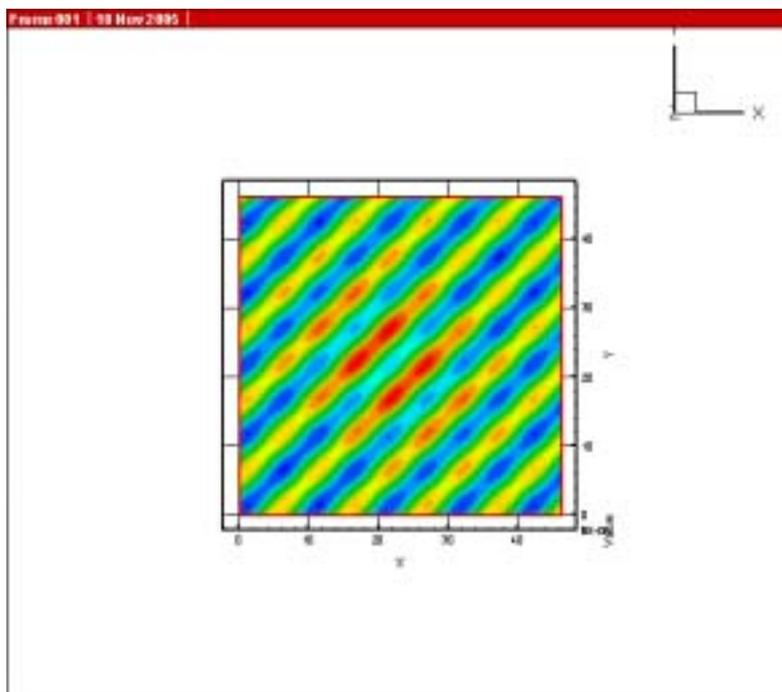
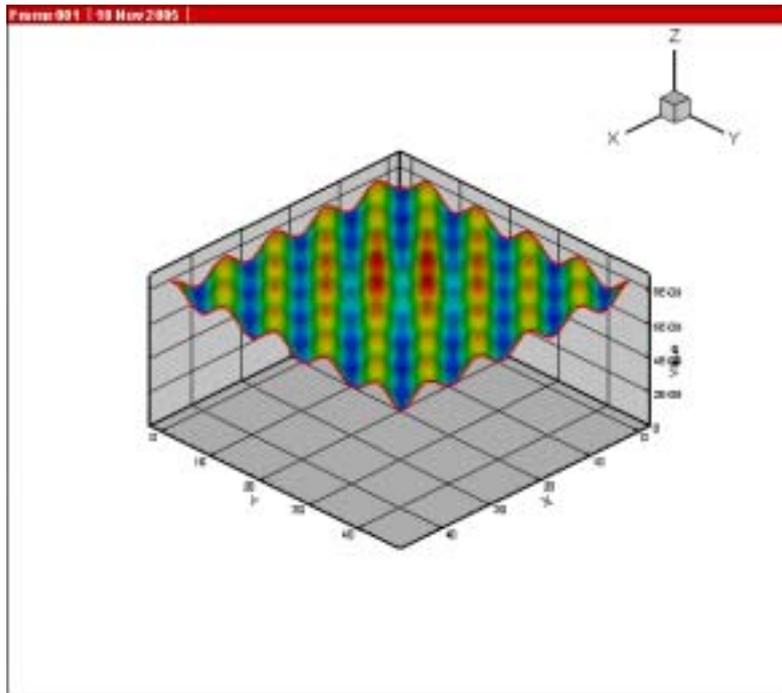
Si(100)_H VBM S_image

水素終端 Si(100)表面から約5 Å 上方における Valence band maximum 近傍の電子状態密度。Fermi エネルギーから、その下方 2.0eV までの電子状態密度を足し合わせたものを表示している。s-state ライクな STM チップとの間の tunnel 電流に比例する量である。



Si(100)_H VBM S_image with Impurity

水素終端 Si(100)表面から約5 Å 上方における Valence band maximum 近傍の電子状態密度。Fermi エネルギーから、その下方 1.5eV までの電子状態密度を足し合わせたものを表示している。表面の下方には、アクセプタ不純物が埋め込まれている。s-state ライクな STM チップとの間の tunnel 電流に比例する量である。

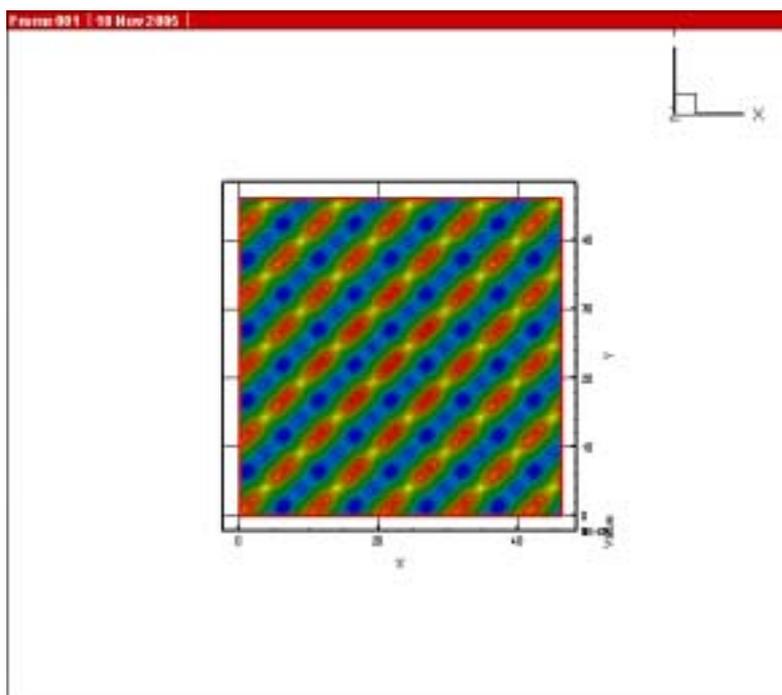
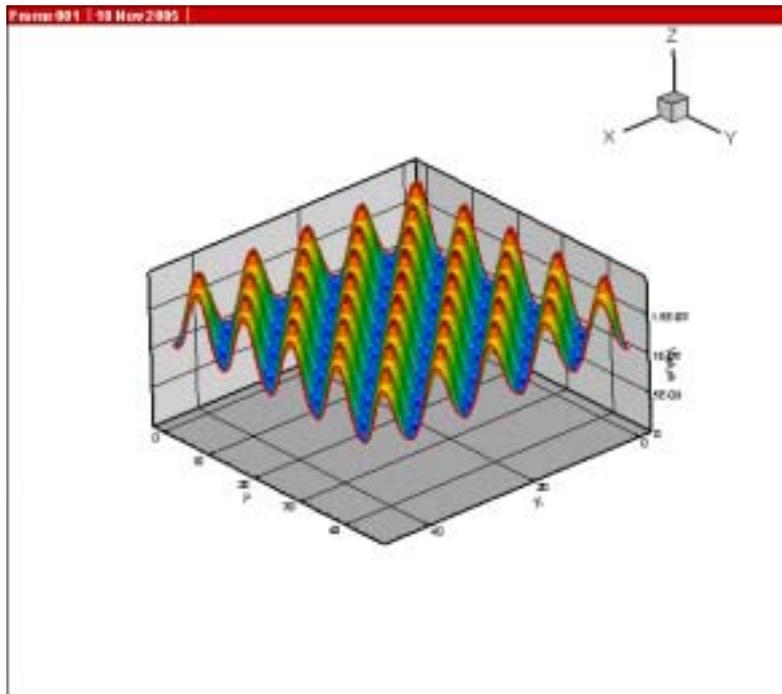


Si(100)_H VBM d_image with Impurity

水素終端 Si(100)表面から約5 Å 上方における Valence band maximum 近傍における以下の量を表示している。

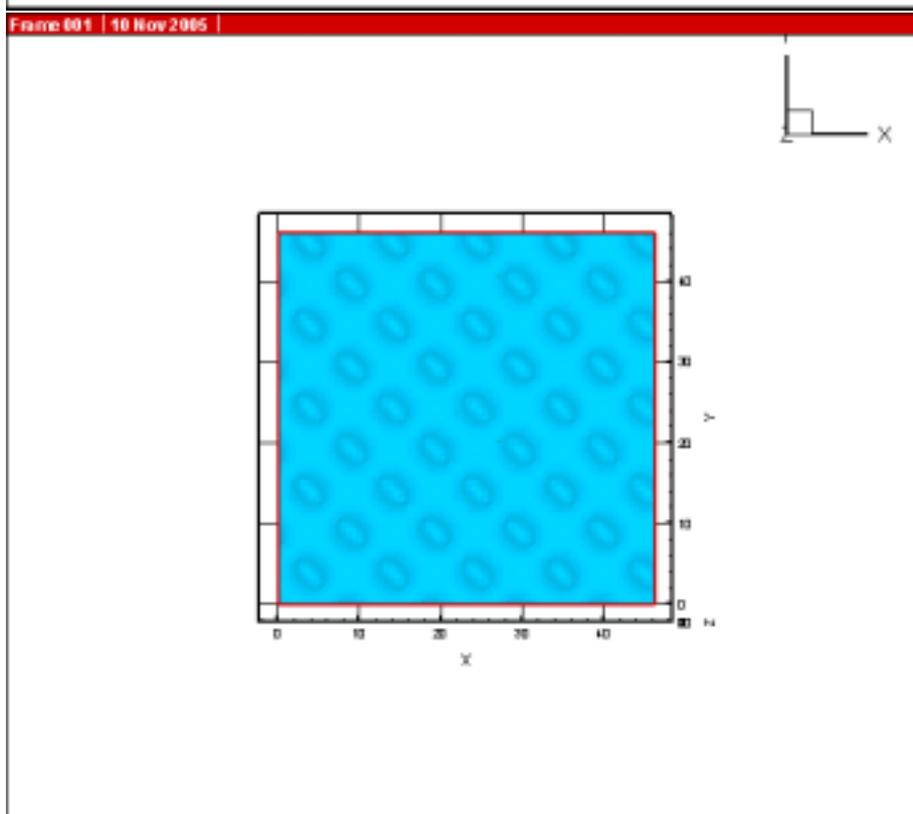
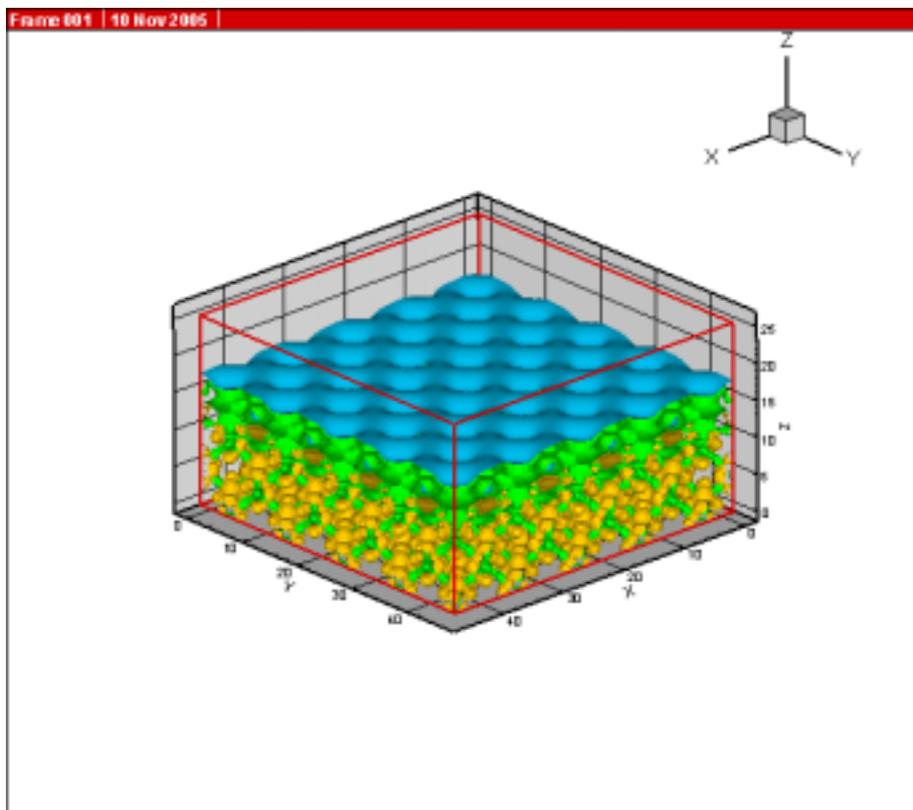
$$\int_{E_F-1.5eV}^{E_F} 5/4\kappa^{-4} \left| 3\partial_z^2 \psi(\vec{r}) - \psi(\vec{r}) \right|^2 D(\varepsilon) d\varepsilon$$

Fermi エネルギーから、その下方 1.5eV までを足し合わせている。表面の下方には、アクセプタ不純物が埋め込まれている。d-state ライクな STM チップとの間の tunnel 電流に比例する量である。



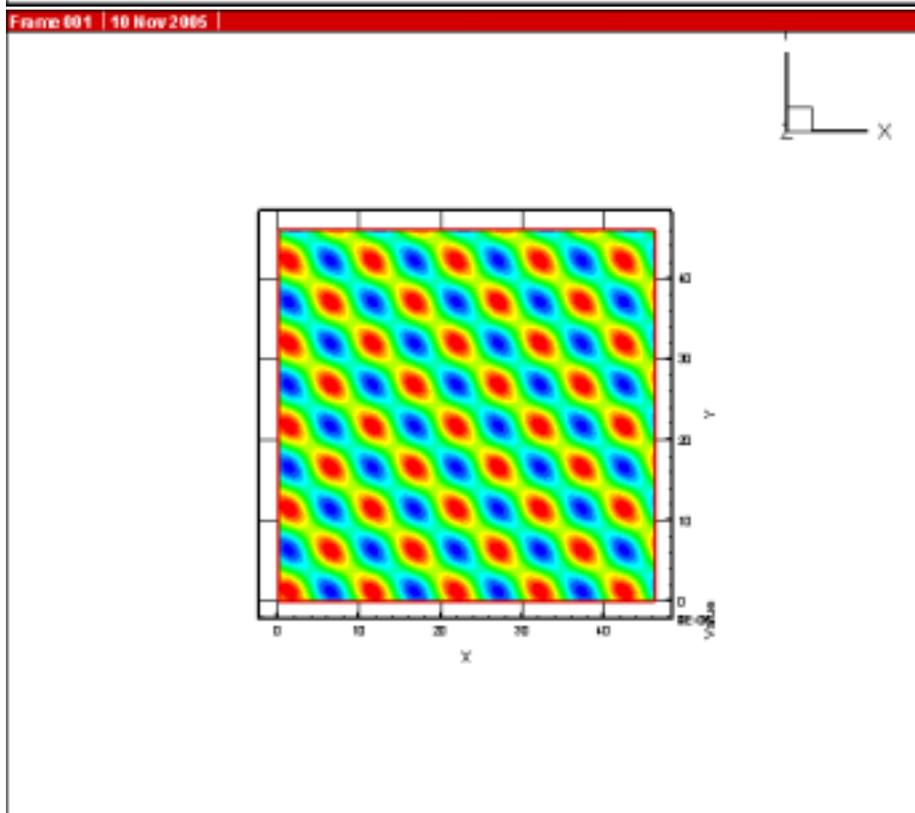
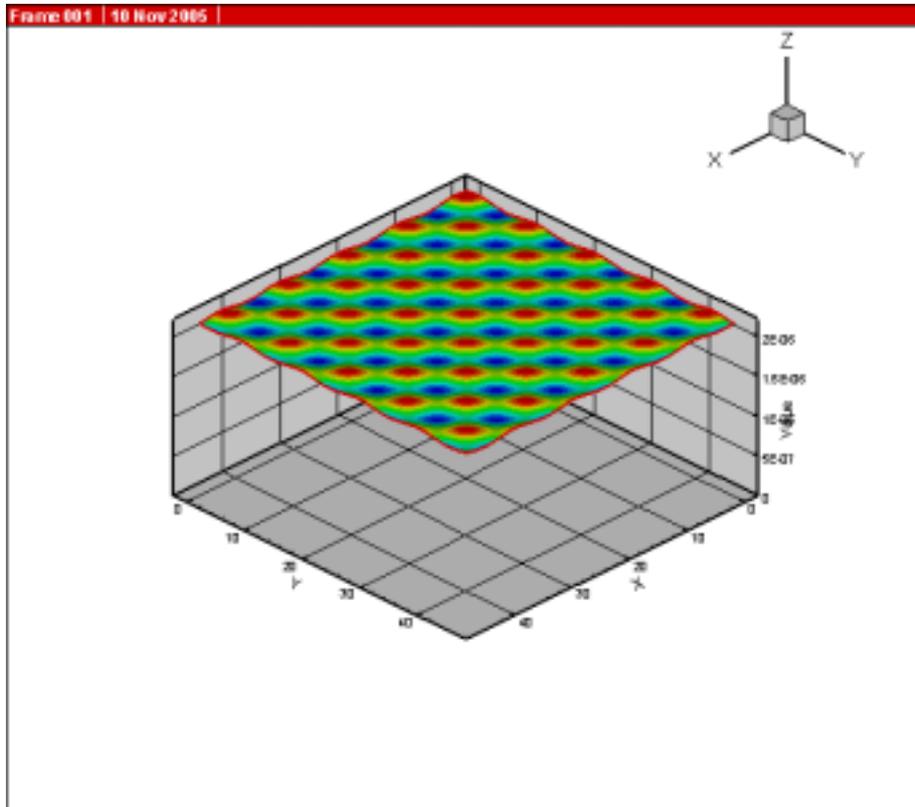
Si(100)_H CBM 電子状態密度

Si(100)表面を水素終端させた表面の Conduction band minimum 近傍の電子状態密度。
Fermi エネルギーから、その上方 1.5eV までの電子状態密度を足し合わせたものを表示している。



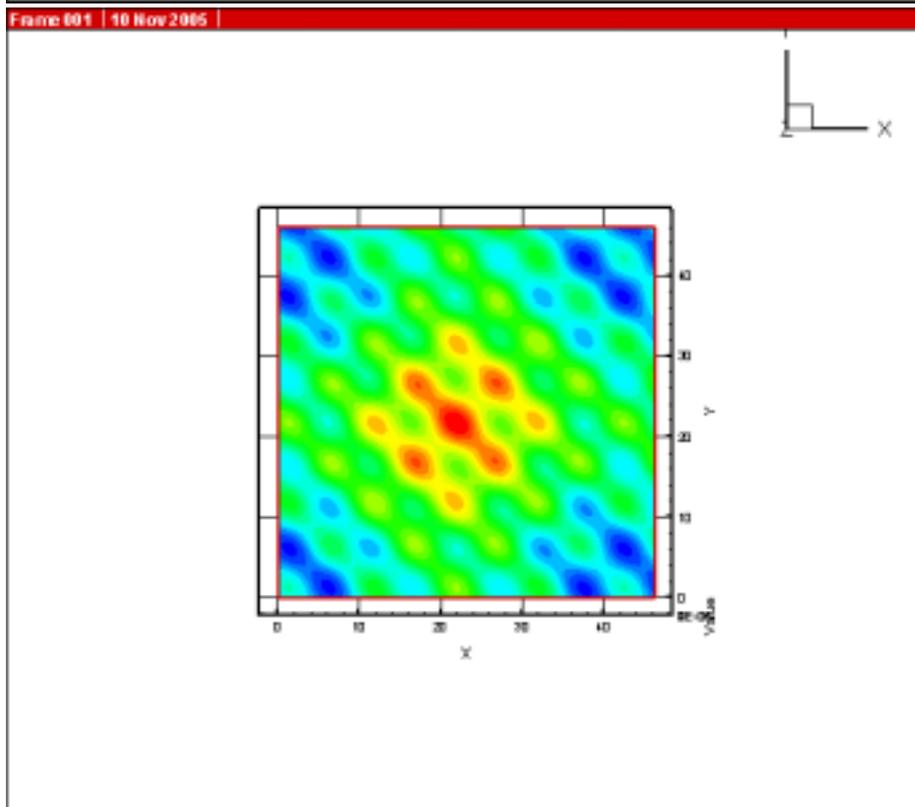
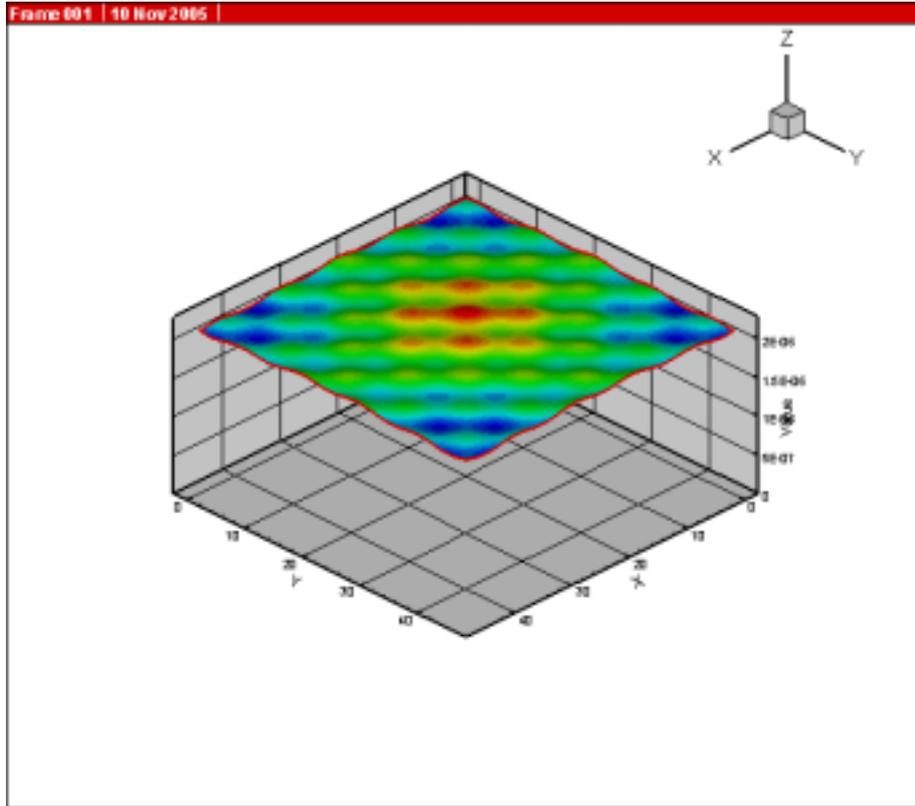
Si(100)_H CBM s_image

水素終端 Si(100)表面から約 5 Å 上方における Conduction band minimum 近傍の電子状態密度。Fermi エネルギーから、上方 1.5eV までの電子状態密度を足し合わせたものを表示している。s-state ライクな STM チップとの間の tunnel 電流に比例する量である。



Si(100)_H CBM s_image with Impurity

水素終端 Si(100)表面から約 5 Å 上方における Conduction band minimum 近傍の電子状態密度。Fermi エネルギーから、その上方 1.0eV までの電子状態密度を足し合わせたものを表示している。表面の下方には、ドナー不純物が埋め込まれている。s-state ライクな STM チップとの間の tunnel 電流に比例する量である。

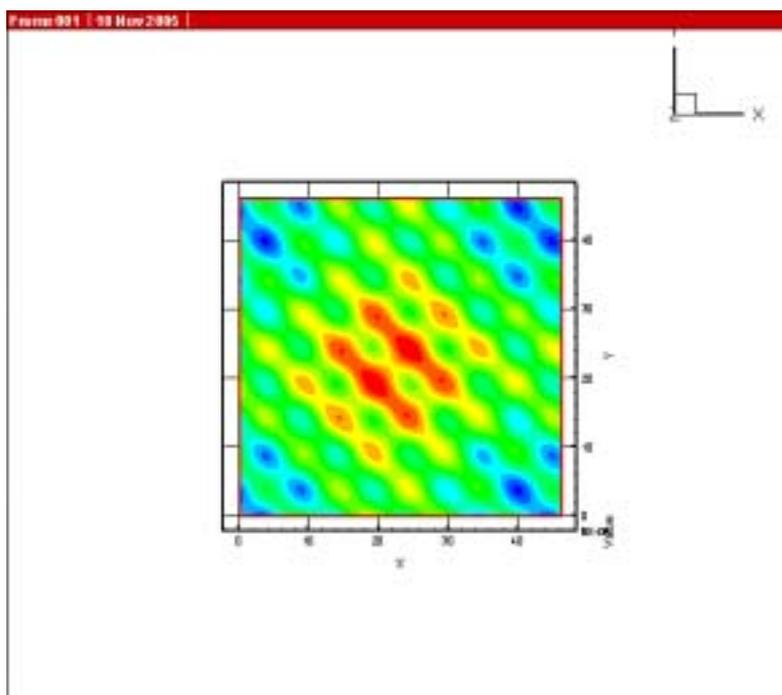
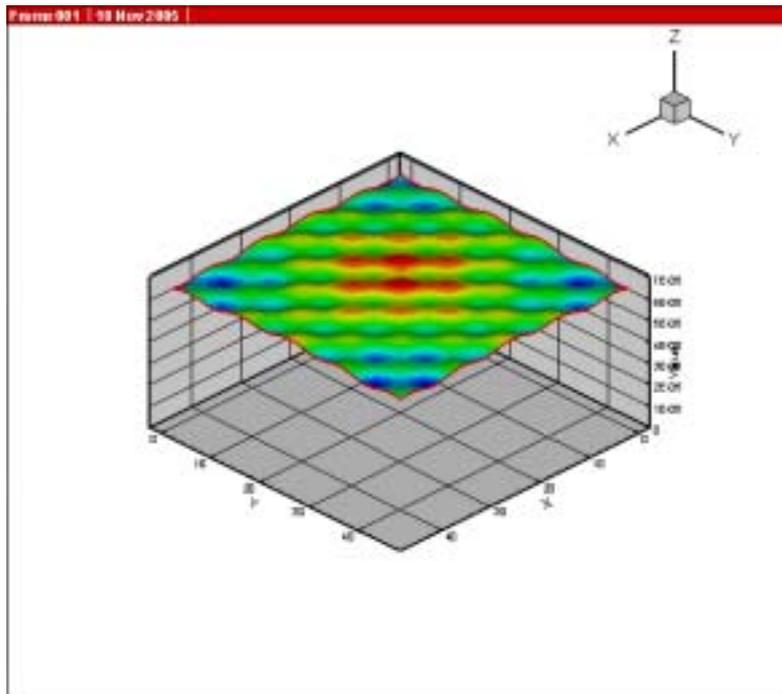


Si(100)_H CBM d_image with Impurity

水素終端 Si(100)表面から約 5 Å 上方における Conduction band minimum 近傍における以下の量を表示している。

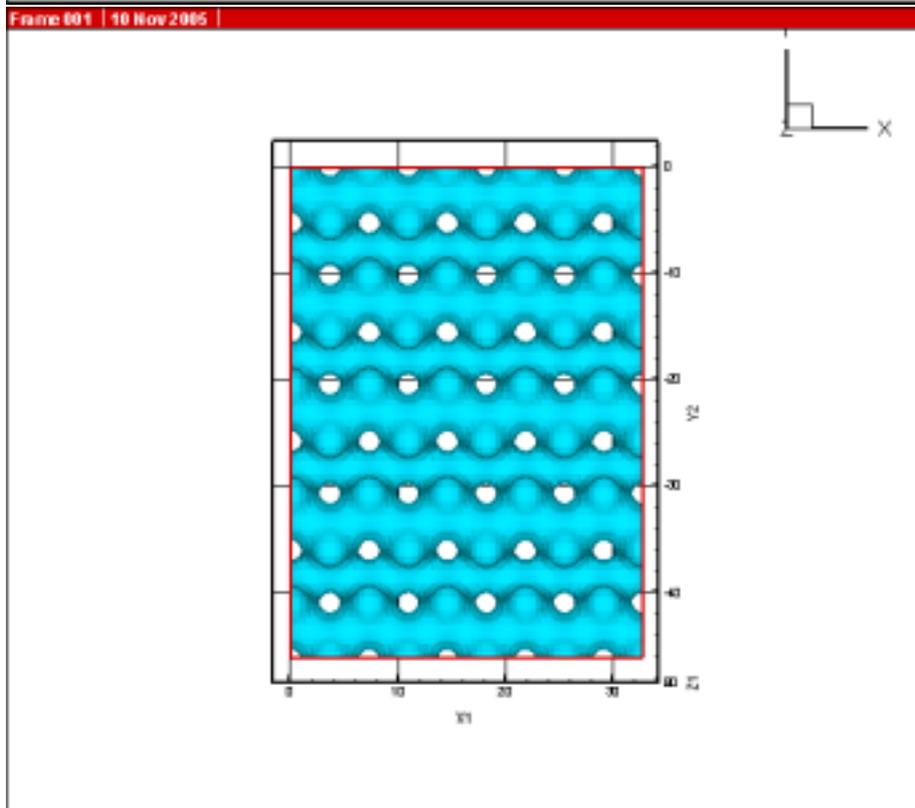
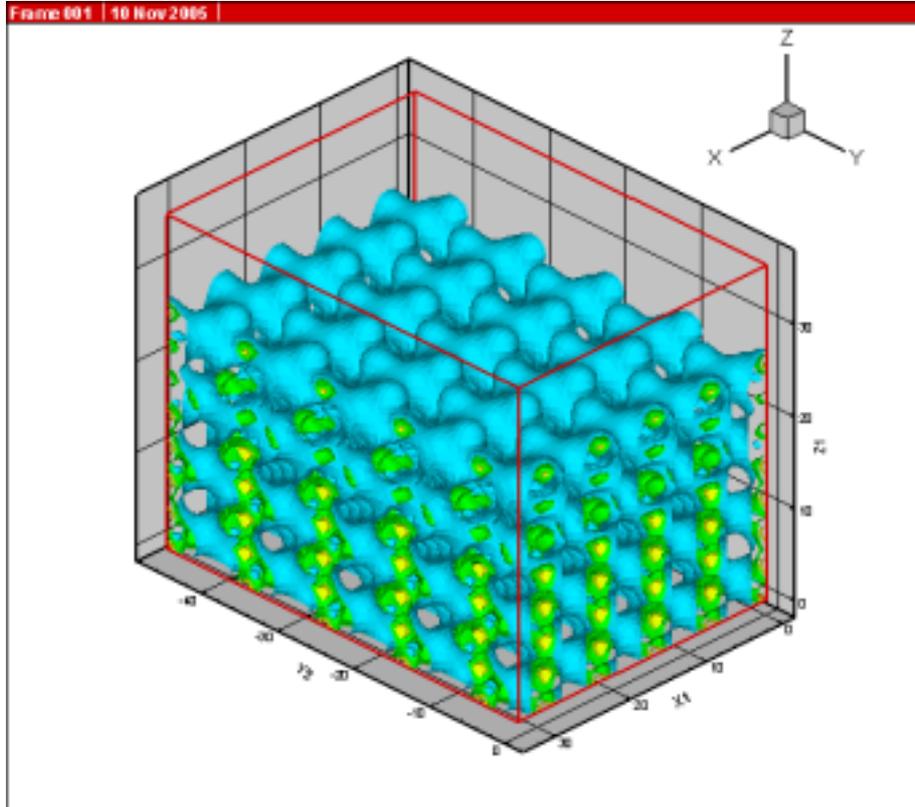
$$\int_{E_F}^{E_F+1.0\text{eV}} 5/4\kappa^{-4} \left| 3\partial_z^2 \psi(\vec{r}) - \psi(\vec{r}) \right|^2 D(\varepsilon) d\varepsilon$$

Fermi エネルギーから、その上方 1.0eV までを足し合わせている。表面の下方には、ドナー不純物が埋め込まれている。d-state ライクな STM チップとの間の tunnel 電流に比例する量である。



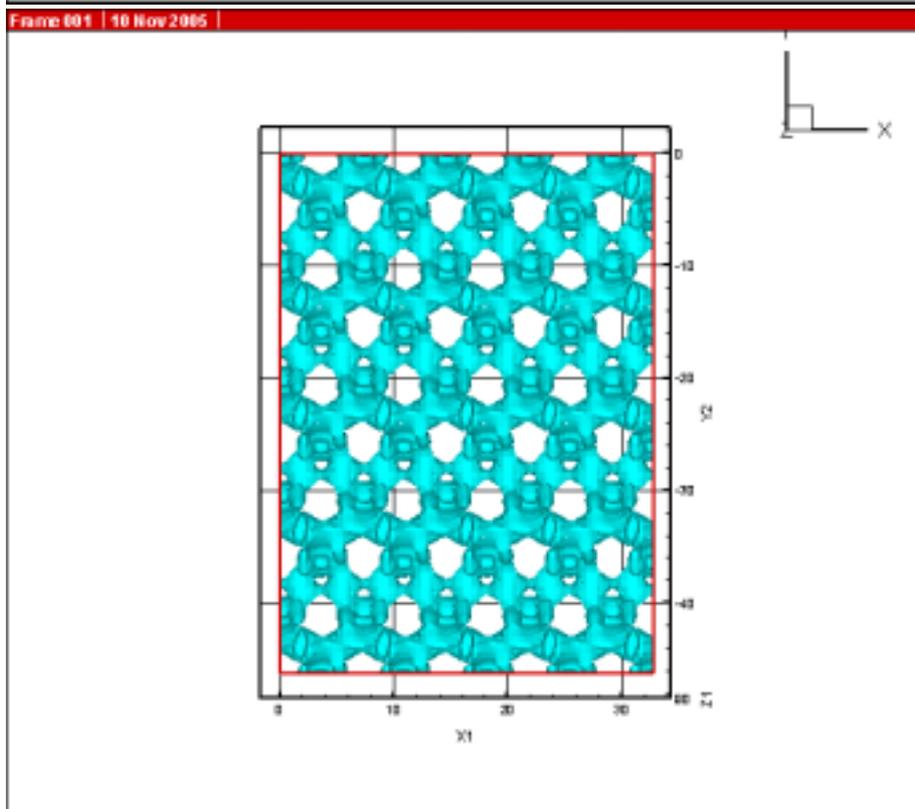
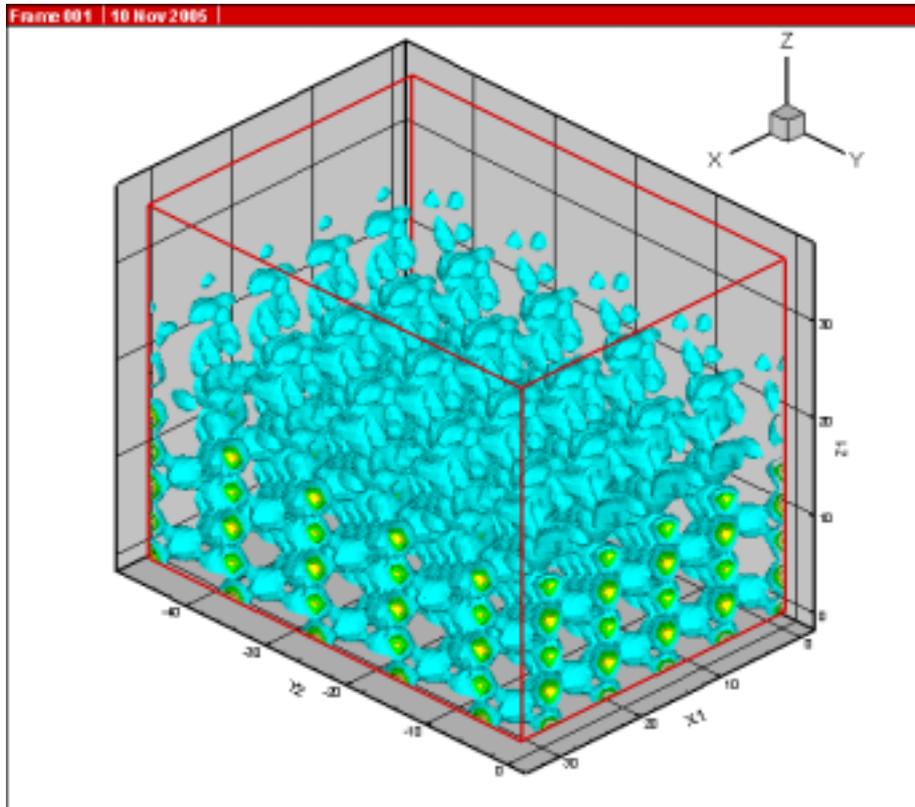
Si(110)_H 電子密度

Si(110)表面を水素終端させた表面の電子状態密度。表面における reconstruction は考慮していない。電子が表面から空間へしみ出す様子を定量的に計算している。



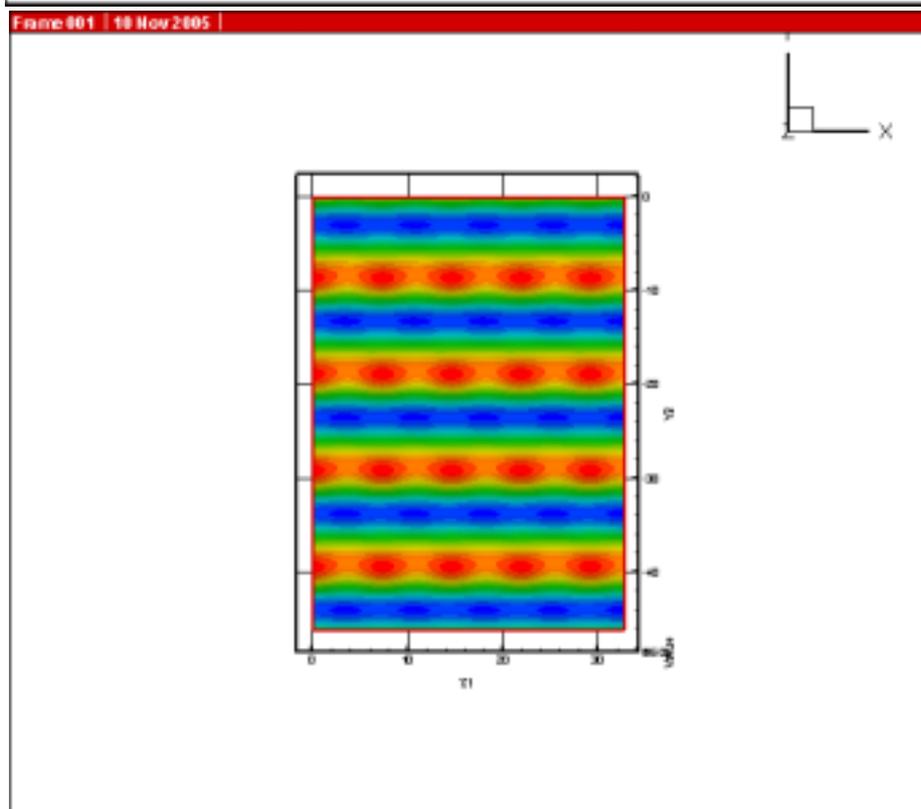
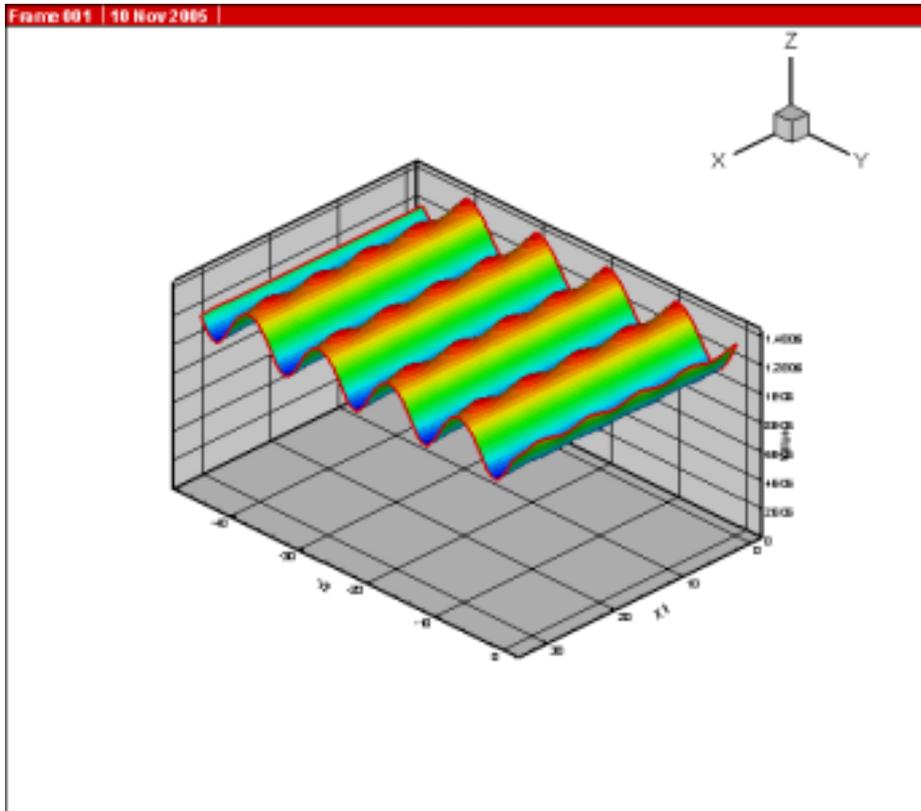
Si(110)_H VBM 電子状態密度

Si(110)表面を水素終端させた表面の Valence band maximum 近傍の電子状態密度。Fermi エネルギーから、その下方 2.0eV までの電子状態密度を足し合わせたものを表示している。



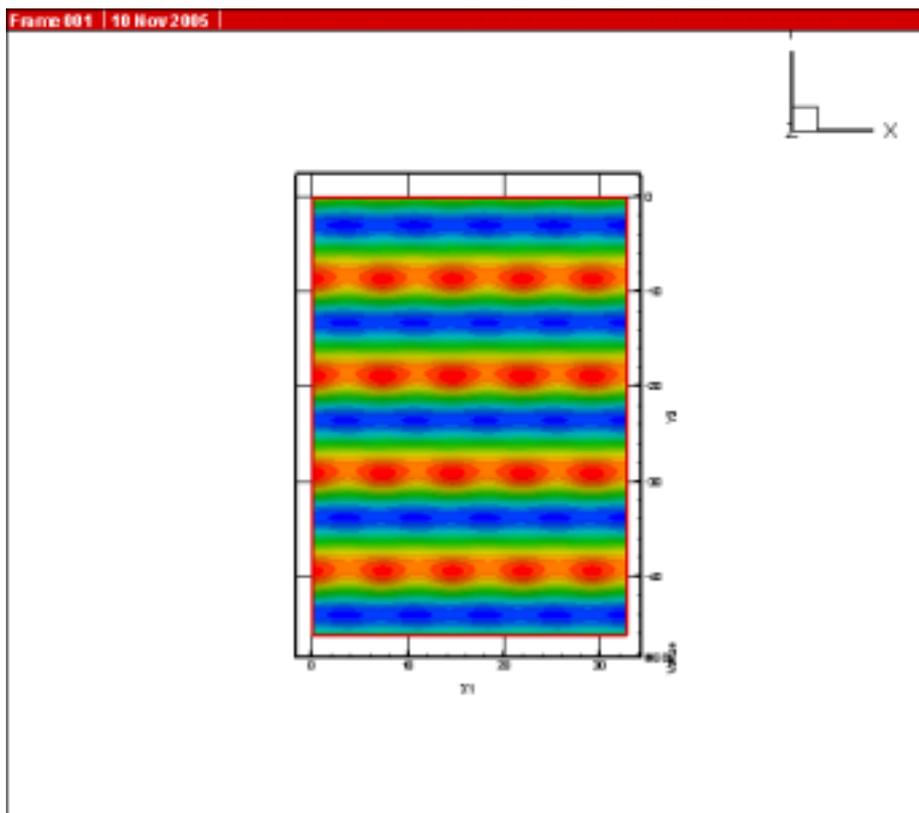
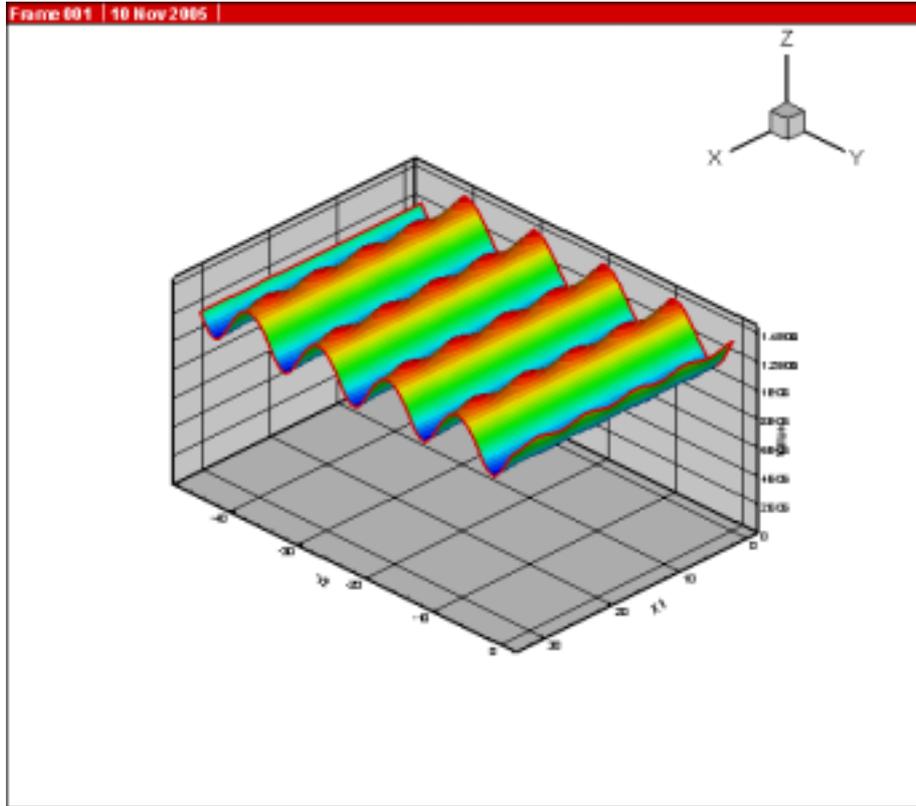
Si(110) VBM s_image

水素終端 Si(110)表面から約5 Å 上方における Valence band maximum 近傍の電子状態密度。Fermi エネルギーから、その下方 2.0eV までの電子状態密度を足し合わせたものを表示している。s-state ライクな STM チップとの間の tunnel 電流に比例する量である。



Si(110)_H VBM s_image with Impurity

水素終端 Si(110)表面から約5 Å 上方における Valence band maximum 近傍の電子状態密度。Fermi エネルギーから、その下方 1.5eV までの電子状態密度を足し合わせたものを表示している。表面の下方には、アクセプタ不純物が埋め込まれている。s-state ライクな STM チップとの間の tunnel 電流に比例する量である。

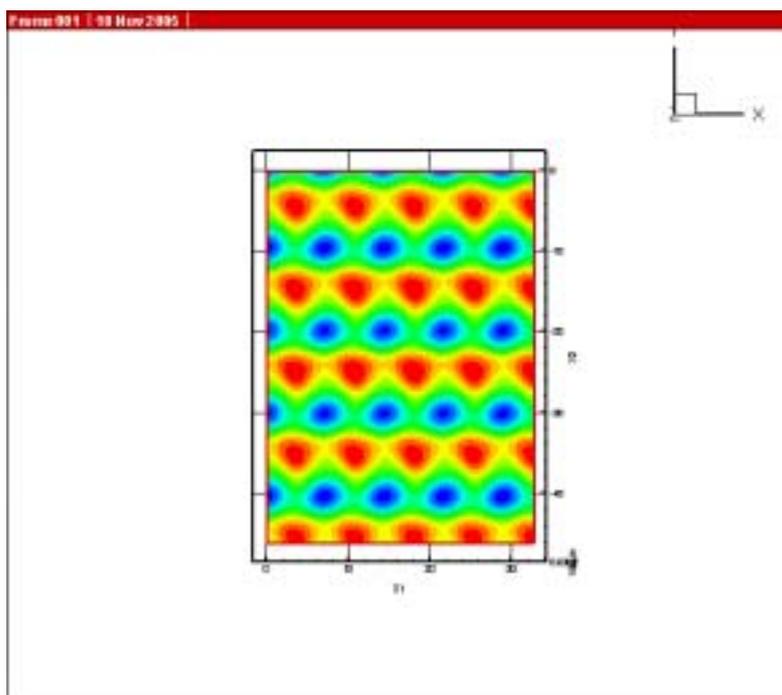
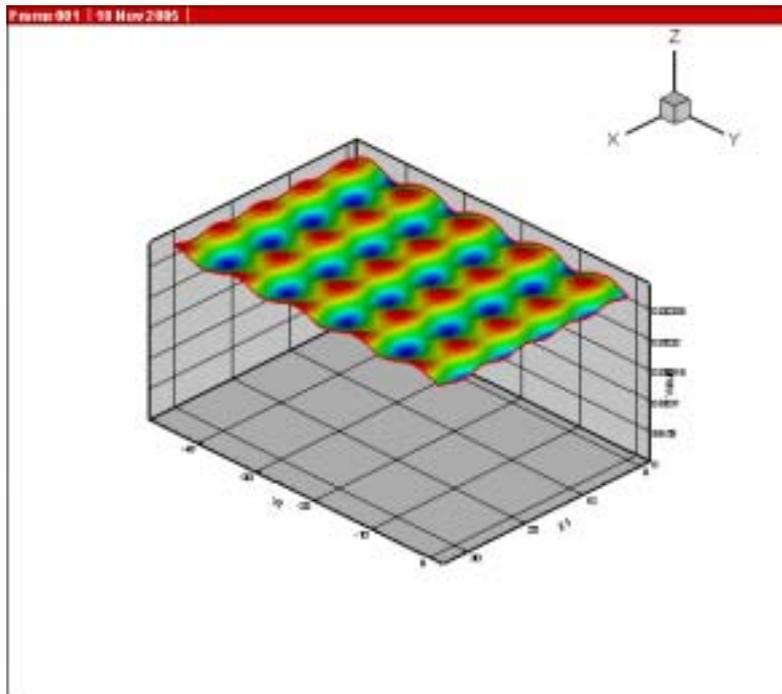


Si(110)_H VBM d_image with Impurity

水素終端 Si(110)表面から約 5 Å 上方における Valence band maximum 近傍における以下の量を表示している。

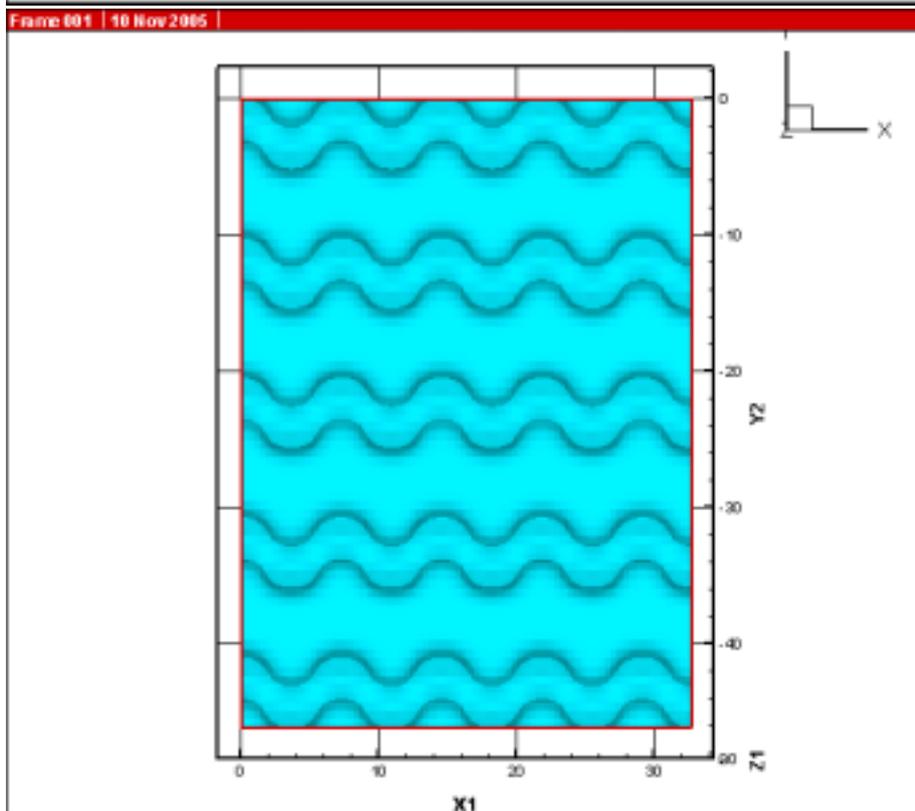
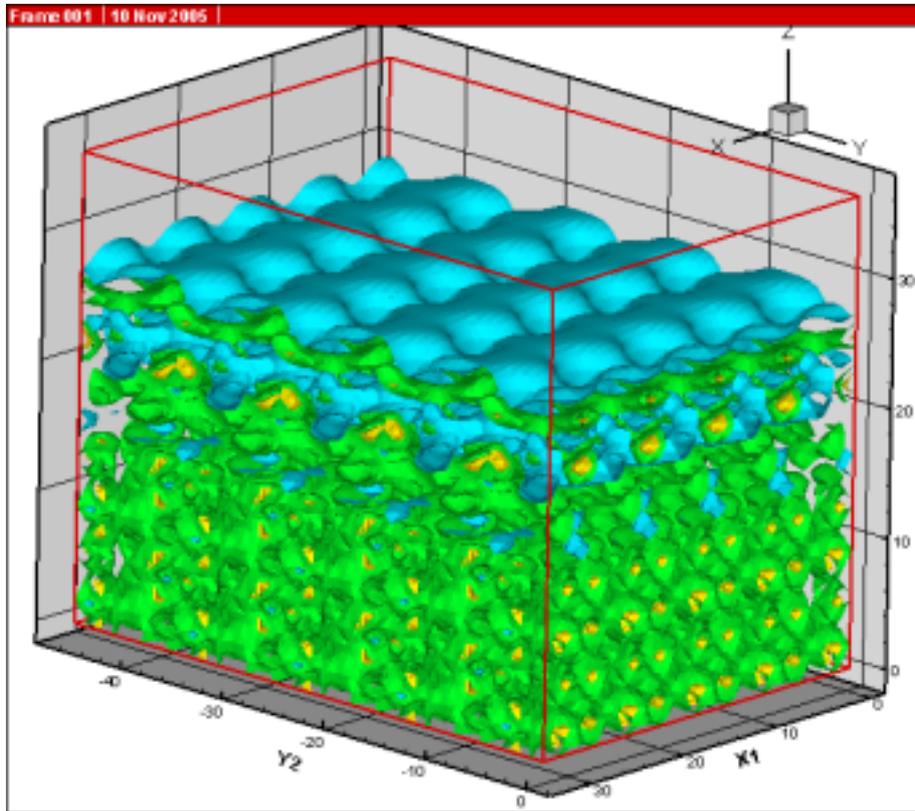
$$\int_{E_F-1.5eV}^{E_F} 5/4\kappa^{-4} |3\partial_z^2\psi(\vec{r}) - \psi(\vec{r})|^2 D(\varepsilon) d\varepsilon$$

Fermi エネルギーから、その下方 1.5eV までを足し合わせている。表面の下方には、アクセプタ不純物が埋め込まれている。d-state ライクな STM チップとの間の tunnel 電流に比例する量である。



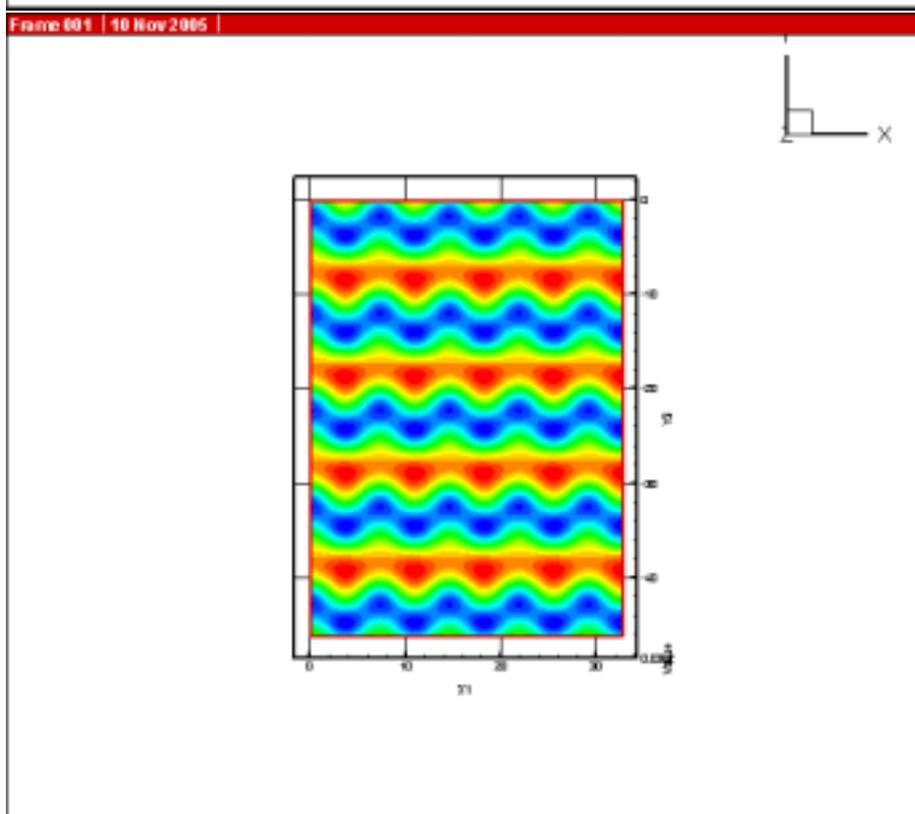
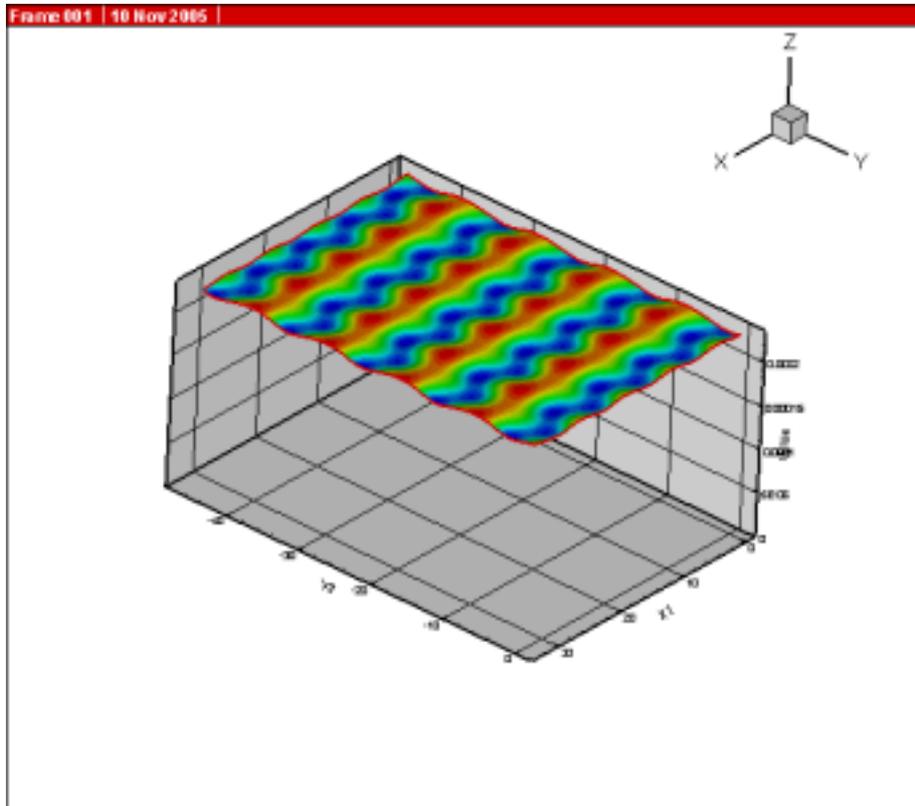
Si(110)_H CBM 電子状態密度

Si(110)表面を水素終端させた表面の Conduction band minimum 近傍の電子状態密度。
Fermi エネルギーから、その上方 1.5eV までの電子状態密度を足し合わせたものを表示している。



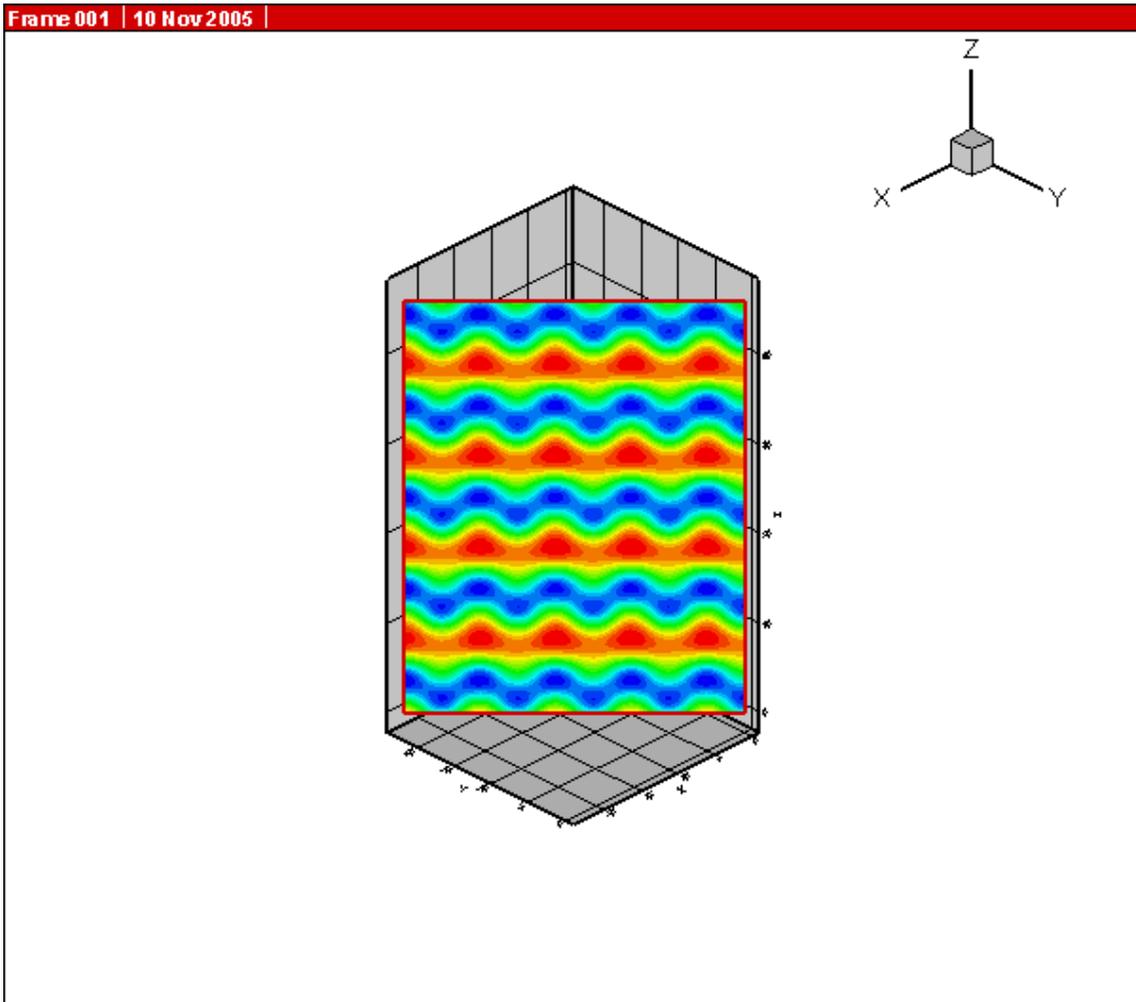
Si(110)_H CBM s_image

水素終端 Si(110)表面から約 5 Å 上方における Conduction band minimum 近傍の電子状態密度。Fermi エネルギーから、上方 1.5eV までの電子状態密度を足し合わせたものを表示している。s-state ライクな STM チップとの間の tunnel 電流に比例する量である。



Si(110)_H CBM s_image with Impurity

水素終端 Si(110)表面から約 5 Å 上方における Conduction band minimum 近傍の電子状態密度。Fermi エネルギーから、その上方 1.0eV までの電子状態密度を足し合わせたものを表示している。表面の下方には、ドナー不純物が埋め込まれている。s-state ライクな STM チップとの間の tunnel 電流に比例する量である。

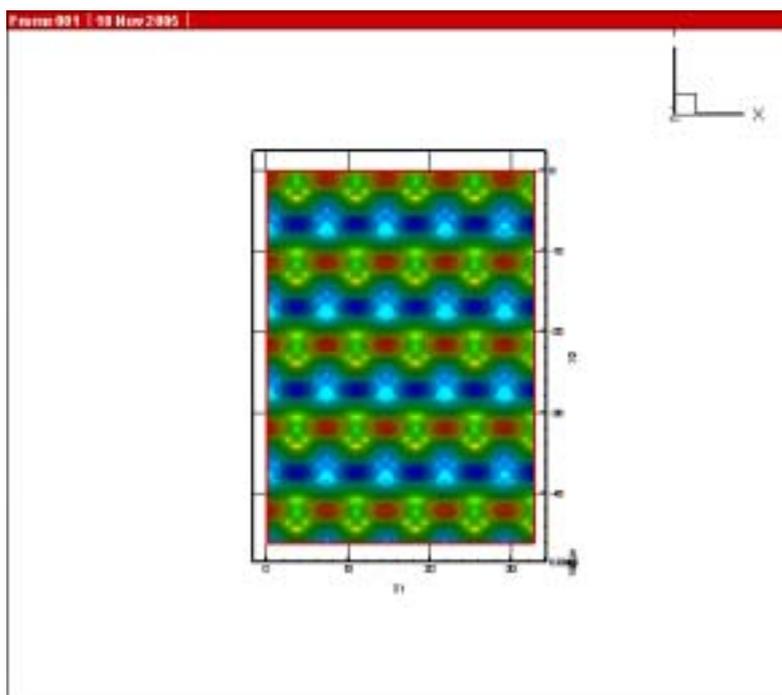
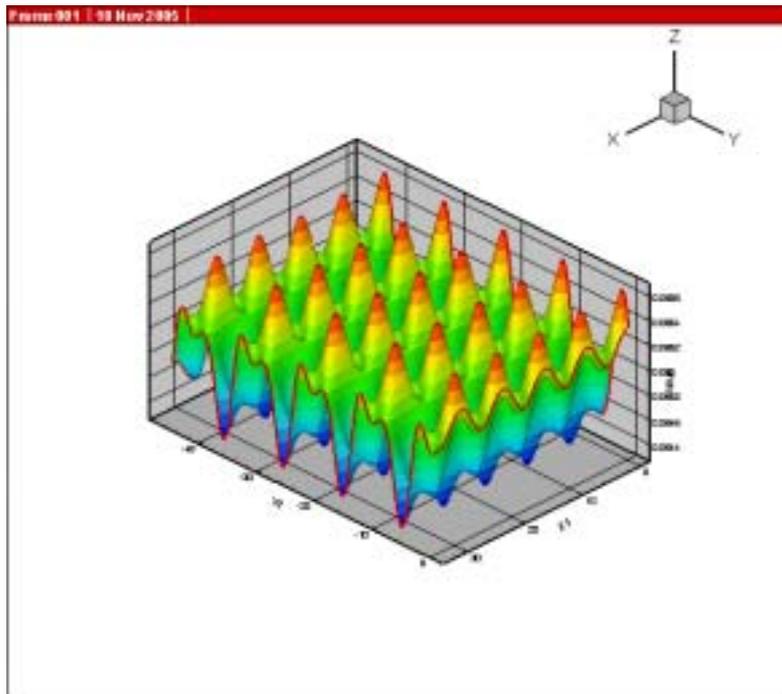


Si(110)_H CBM d_image with Impurity

水素終端 Si(110)表面から約 5 Å 上方における Conduction band minimum 近傍における以下の量を表示している。

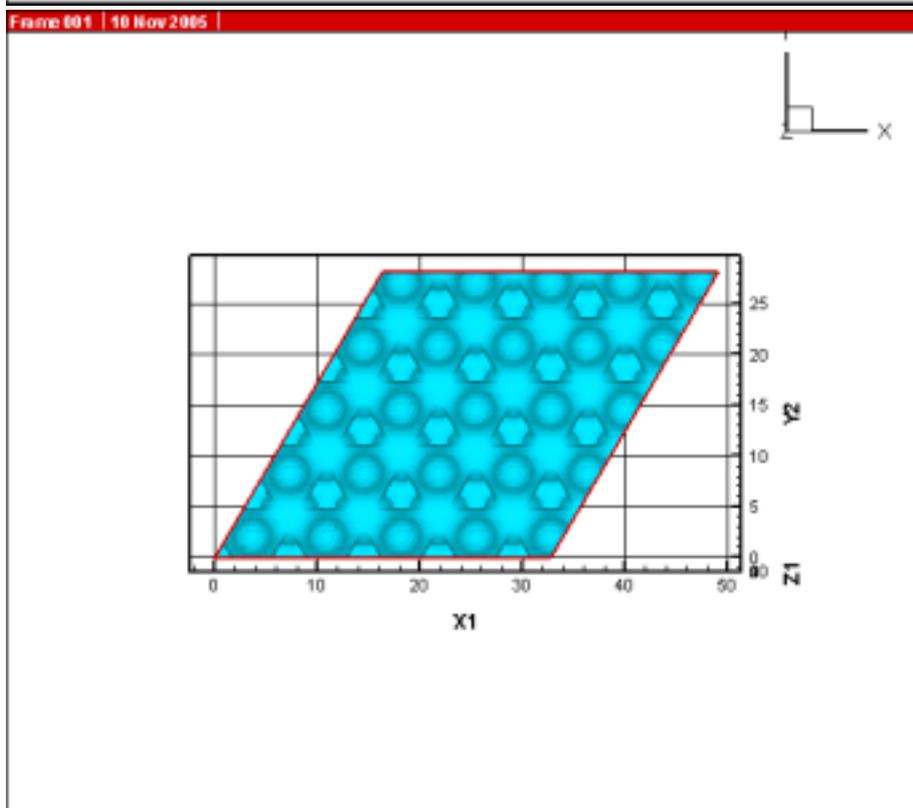
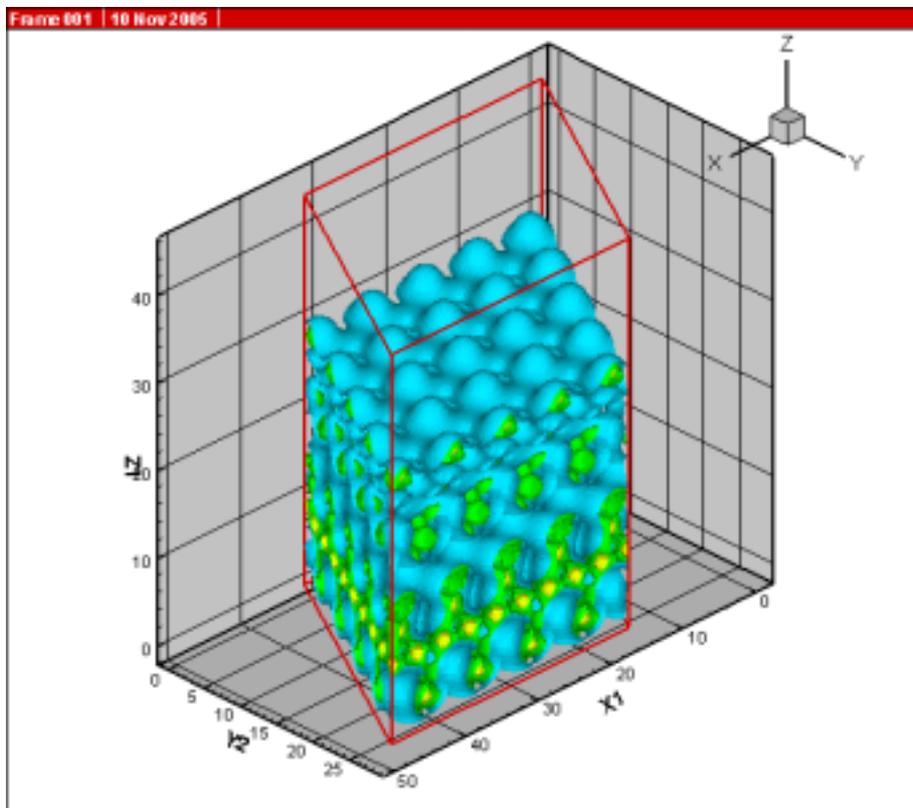
$$\int_{E_F}^{E_F+1.0\text{eV}} 5/4\kappa^{-4} \left| 3\partial_z^2 \psi(\vec{r}) - \psi(\vec{r}) \right|^2 D(\varepsilon) d\varepsilon$$

Fermi エネルギーから、その上方 1.0eV までを足し合わせている。表面の下方には、ドナー不純物が埋め込まれている。d-state ライクな STM チップとの間の tunnel 電流に比例する量である。



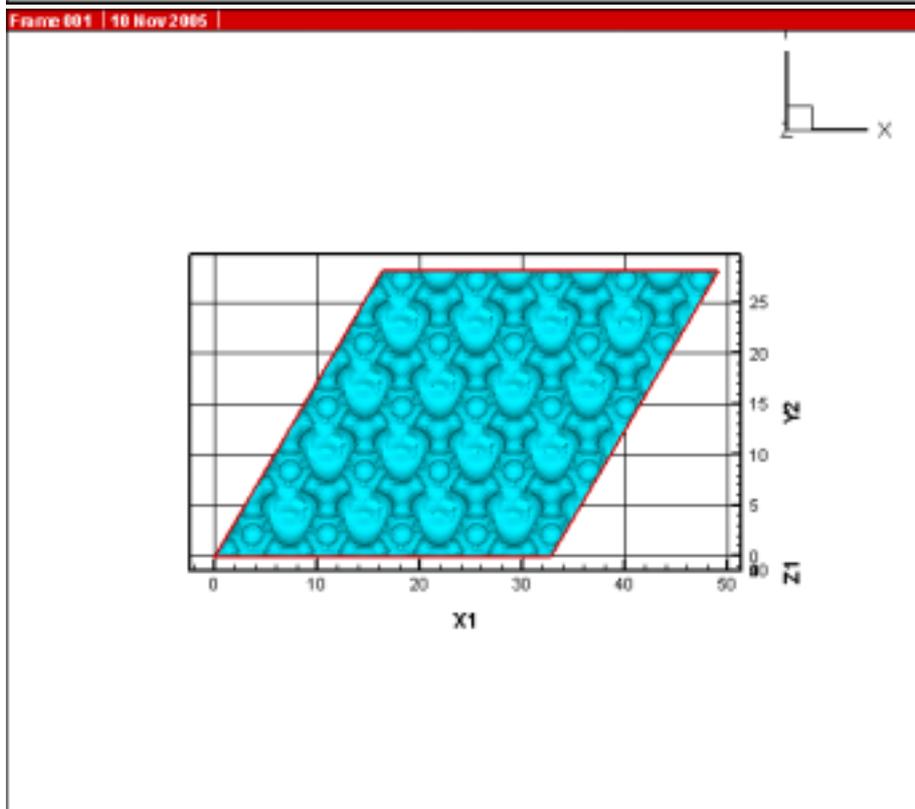
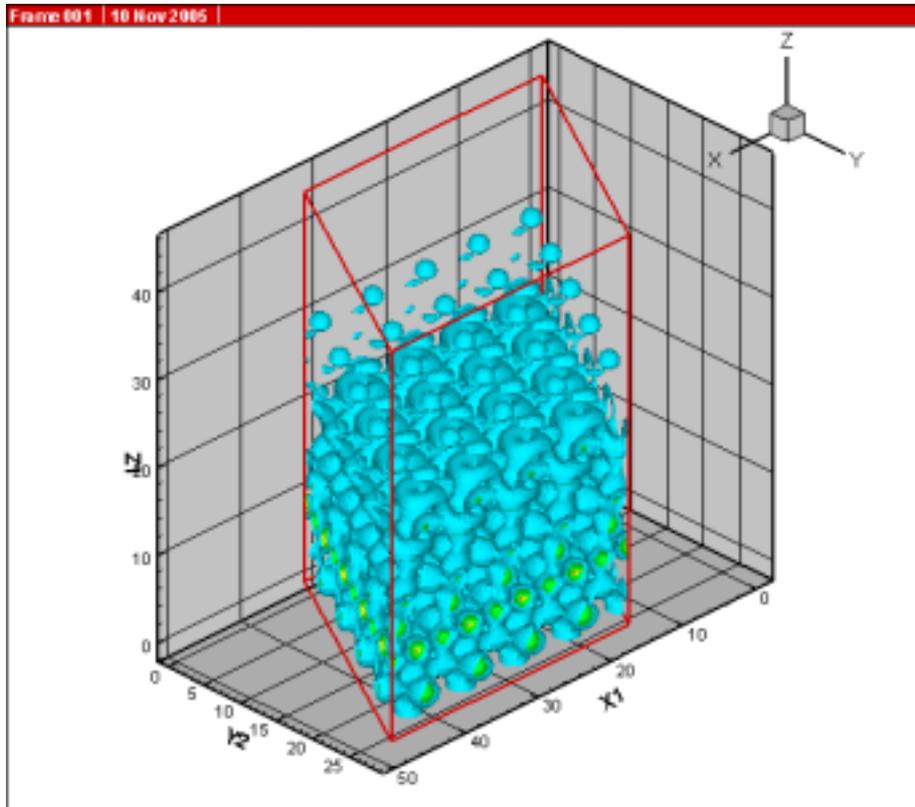
Si(111)_H 電子密度

Si(111)表面を水素終端させた表面の電子状態密度。表面における reconstruction は考慮していない。電子が表面から空間へしみ出す様子を定量的に計算している。



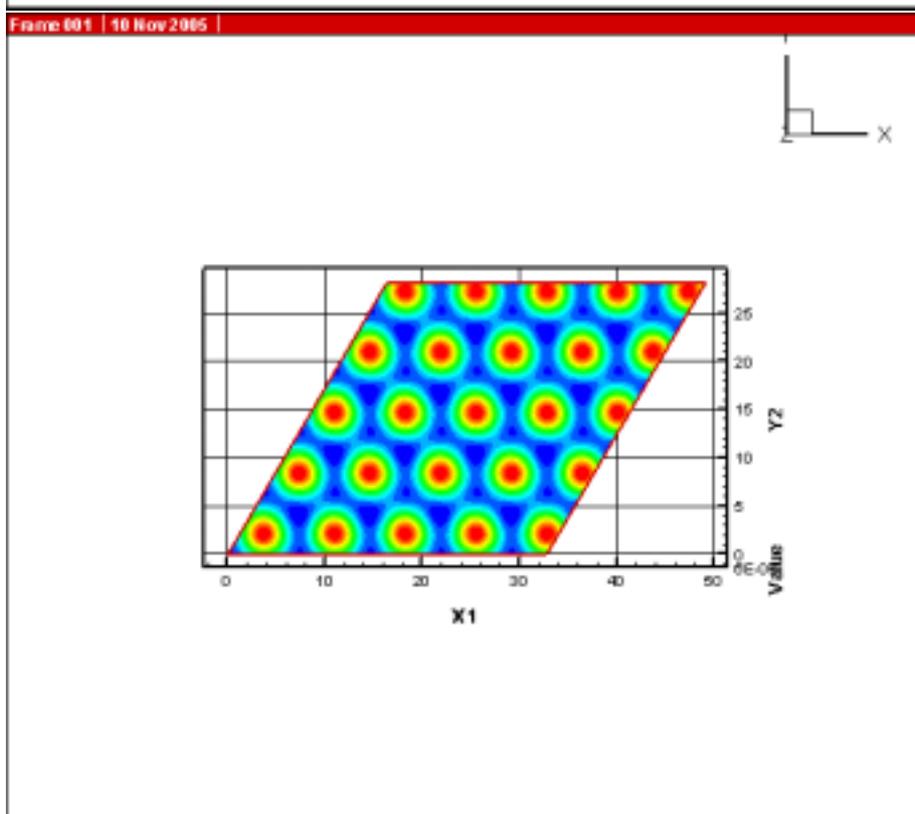
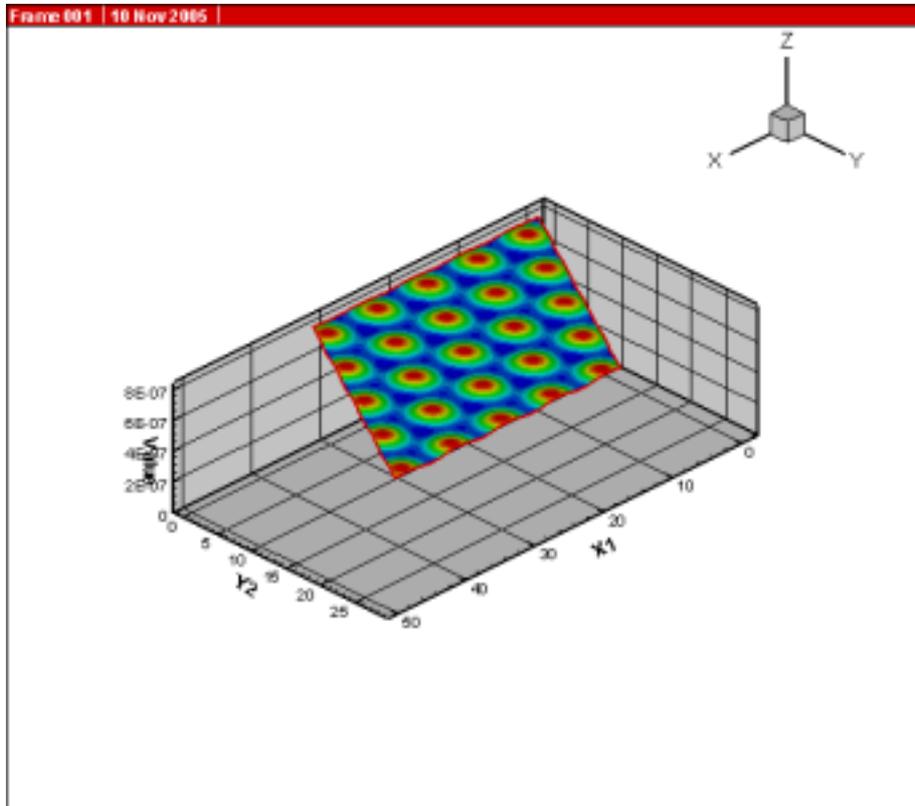
Si(111)_H VBM 電子状態密度

Si(111)表面を水素終端させた表面の Valence band maximum 近傍の電子状態密度。Fermi エネルギーから、その下方 2.0eV までの電子状態密度を足し合わせたものを表示している。



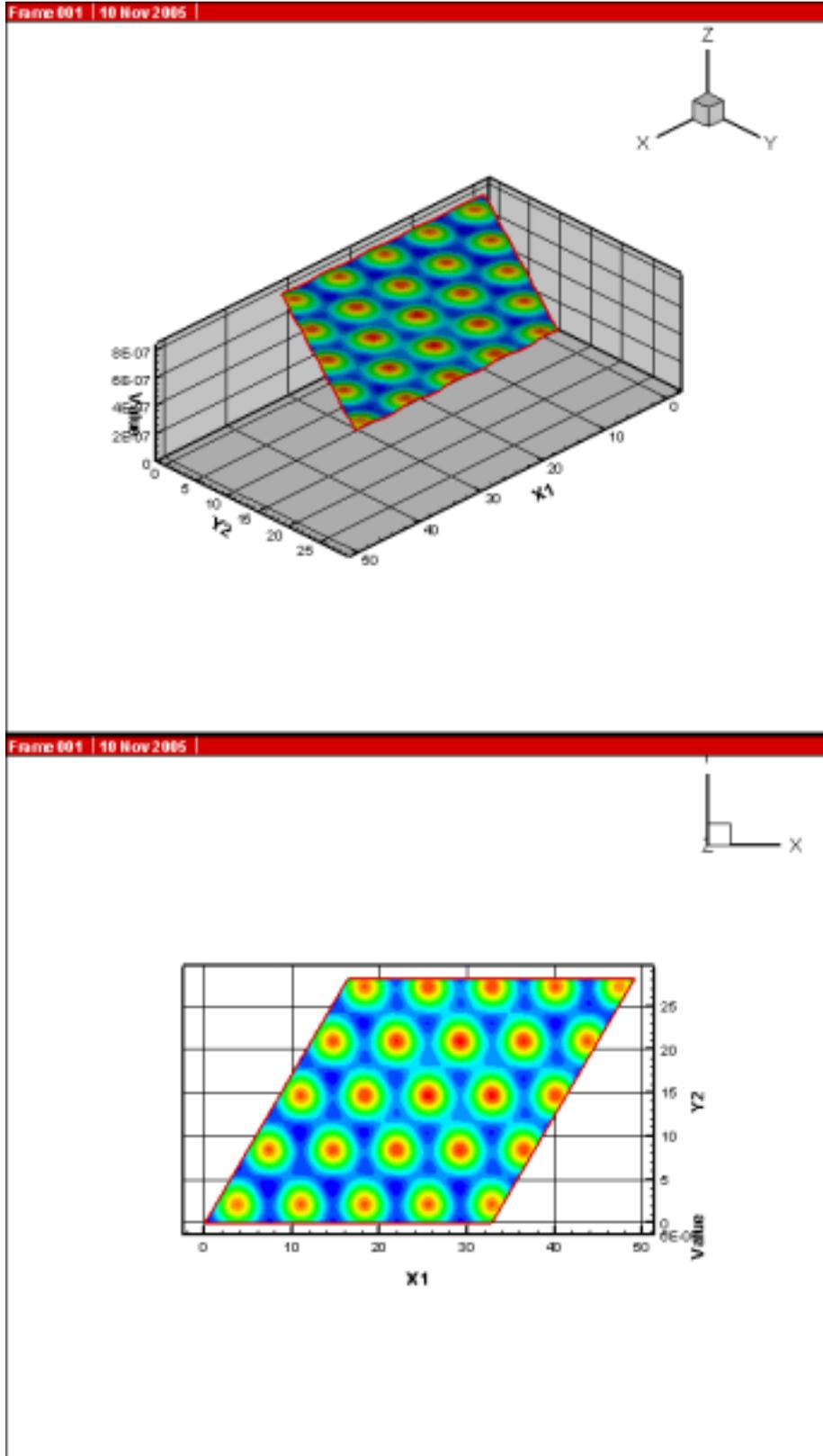
Si(111)_H VBM s_image

水素終端 Si(111)表面から約 5 Å 上方における Valence band maximum 近傍の電子状態密度。Fermi エネルギーから、その下方 2.0eV までの電子状態密度を足し合わせたものを表示している。s-state ライクな STM チップとの間の tunnel 電流に比例する量である。



Si(111)_H VBM s_image with Impurity

水素終端 Si(111)表面から約 5 Å 上方における Valence band maximum 近傍の電子状態密度。Fermi エネルギーから、その下方 1.5eV までの電子状態密度を足し合わせたものを表示している。表面の下方には、アクセプタ不純物が埋め込まれている。s-state ライクな STM チップとの間の tunnel 電流に比例する量である。

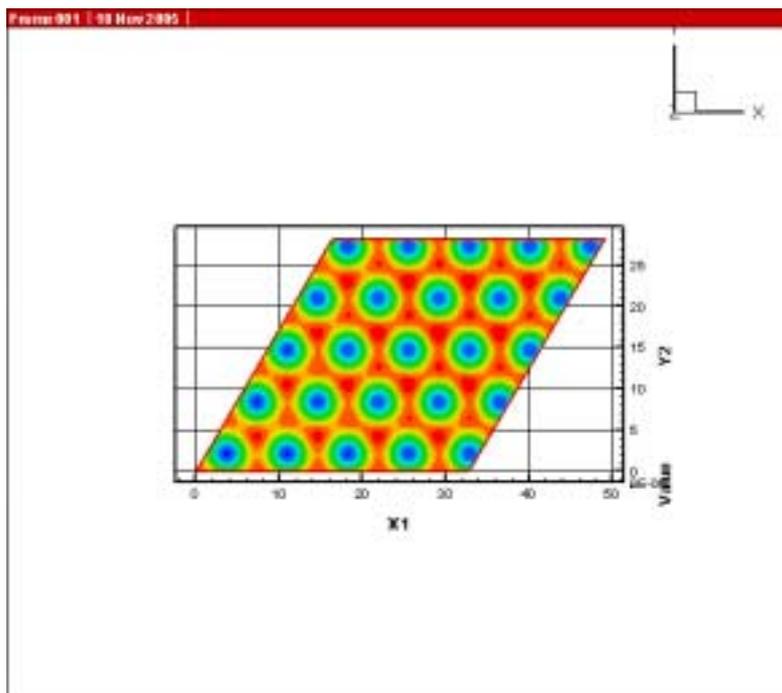
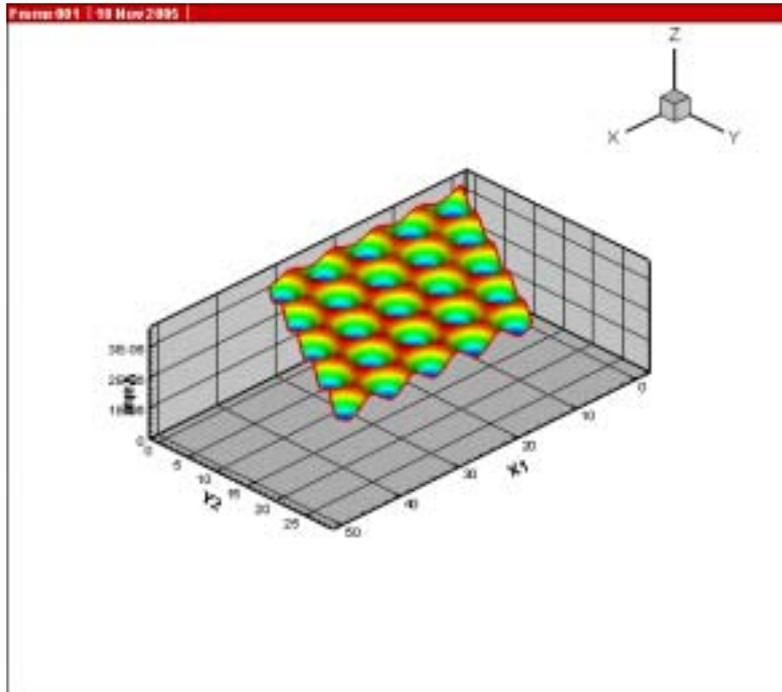


Si(111)_H VBM d_image with Impurity

水素終端 Si(111)表面から約 5 Å 上方における Valence band maximum 近傍における以下の量を表示している。

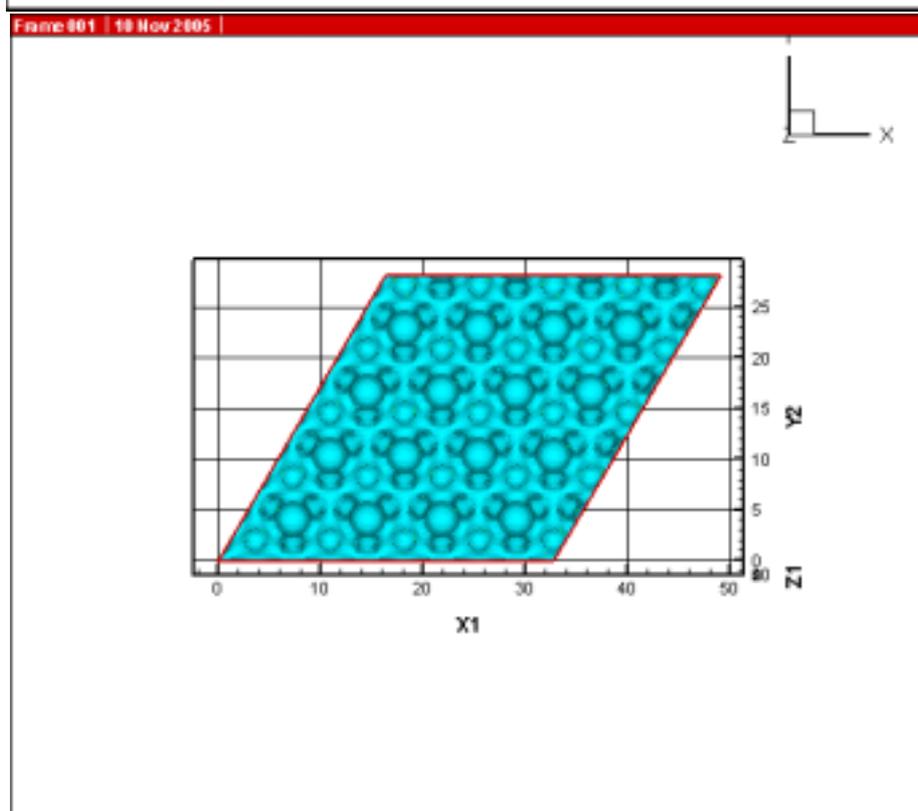
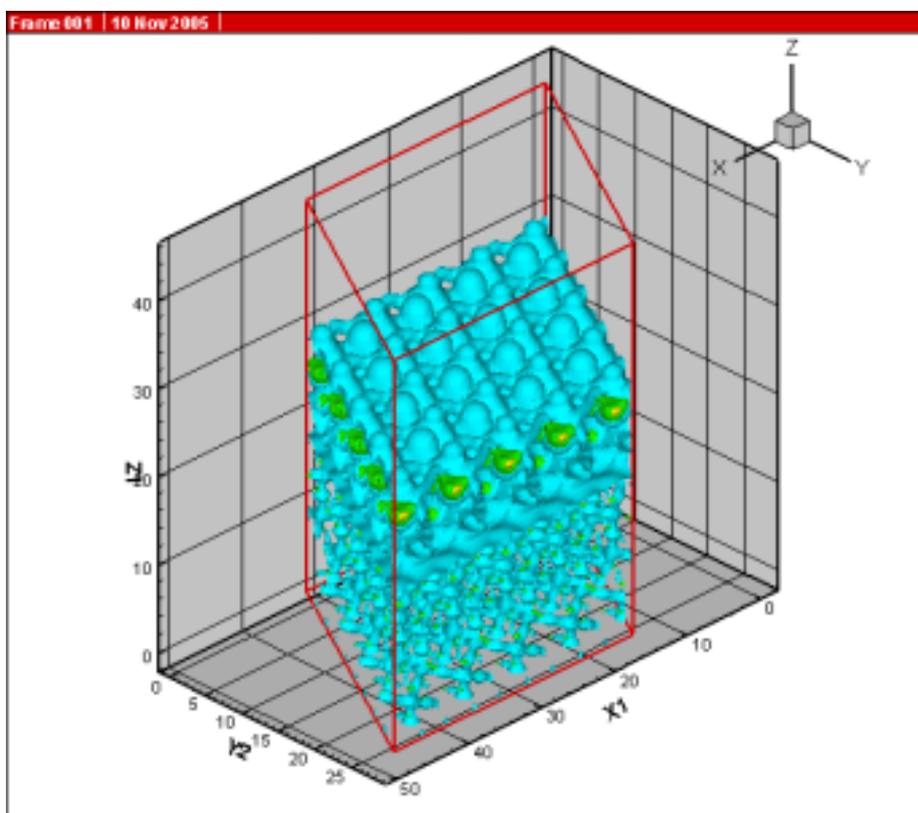
$$\int_{E_F-1.5eV}^{E_F} 5/4\kappa^{-4} |3\partial_z^2\psi(\vec{r}) - \psi(\vec{r})|^2 D(\epsilon)d\epsilon$$

Fermi エネルギーから、その下方 1.5eV までを足し合わせている。表面の下方には、アクセプタ不純物が埋め込まれている。d-state ライクな STM チップとの間の tunnel 電流に比例する量である。



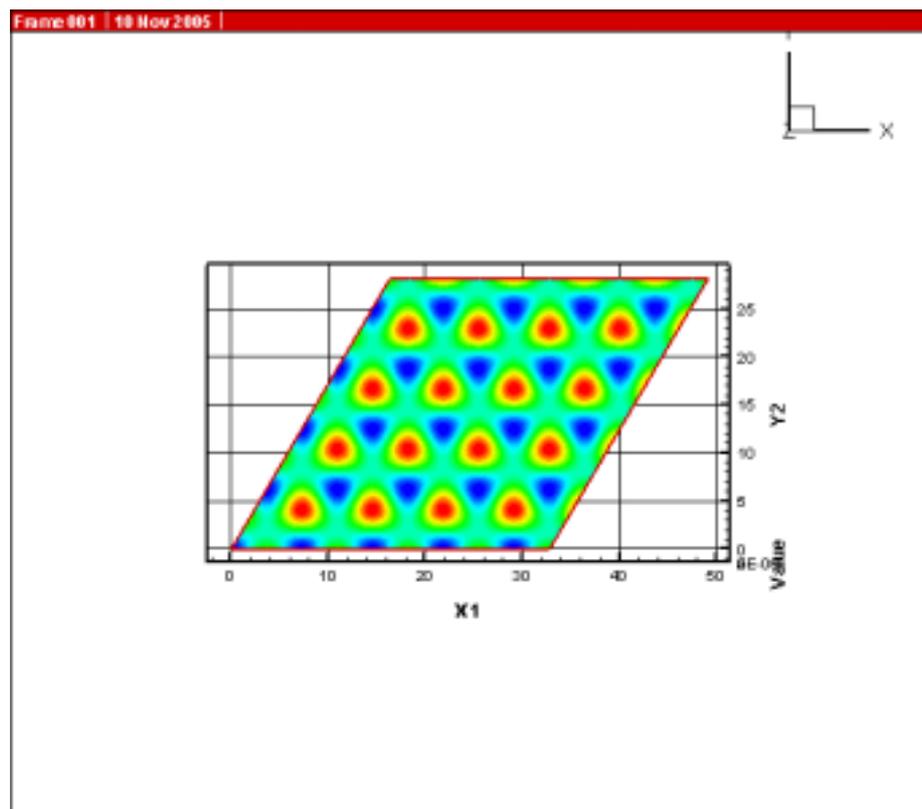
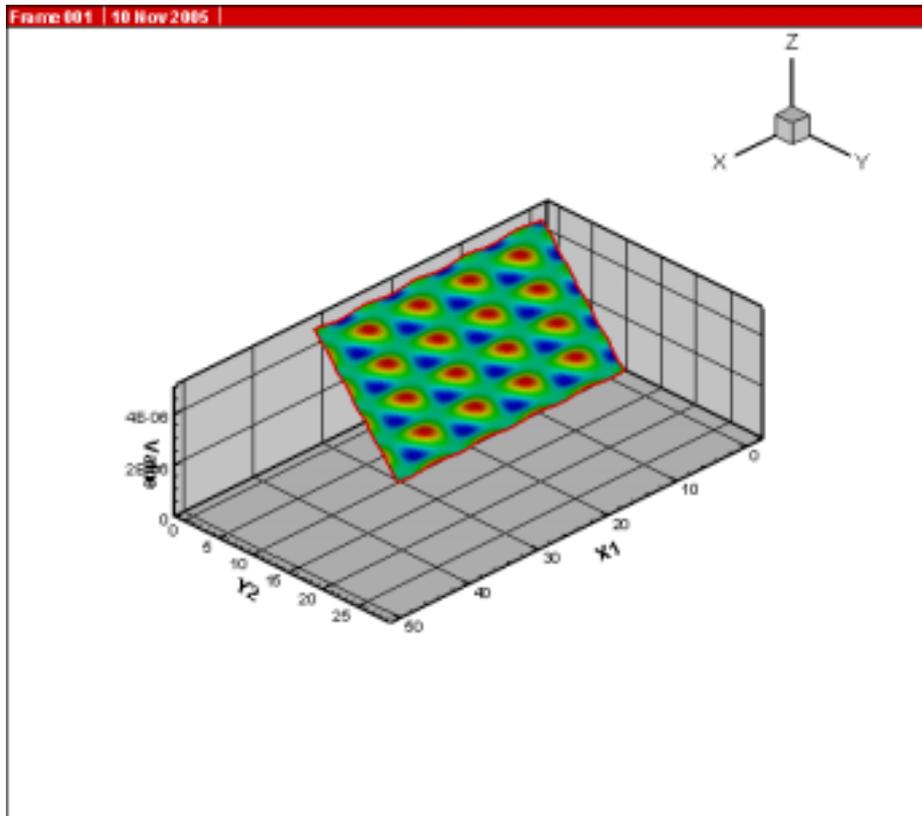
Si(111)_H CBM 電子状態密度

Si(111)表面を水素終端させた表面の Conduction band minimum 近傍の電子状態密度。
Fermi エネルギーから、その上方 1.5eV までの電子状態密度を足し合わせたものを表示している。



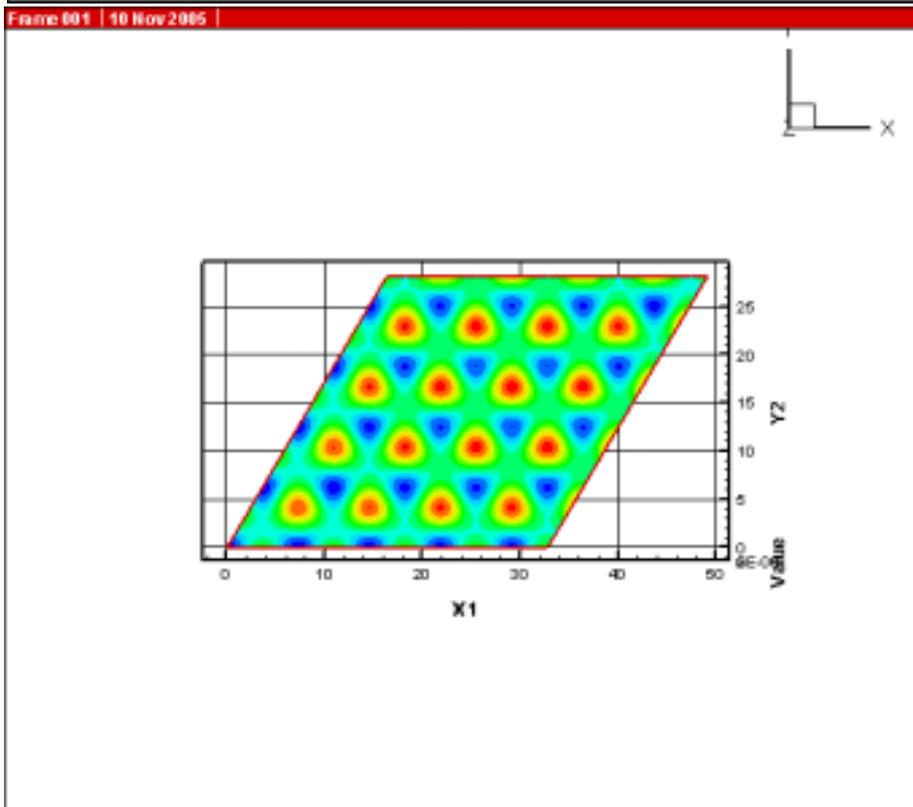
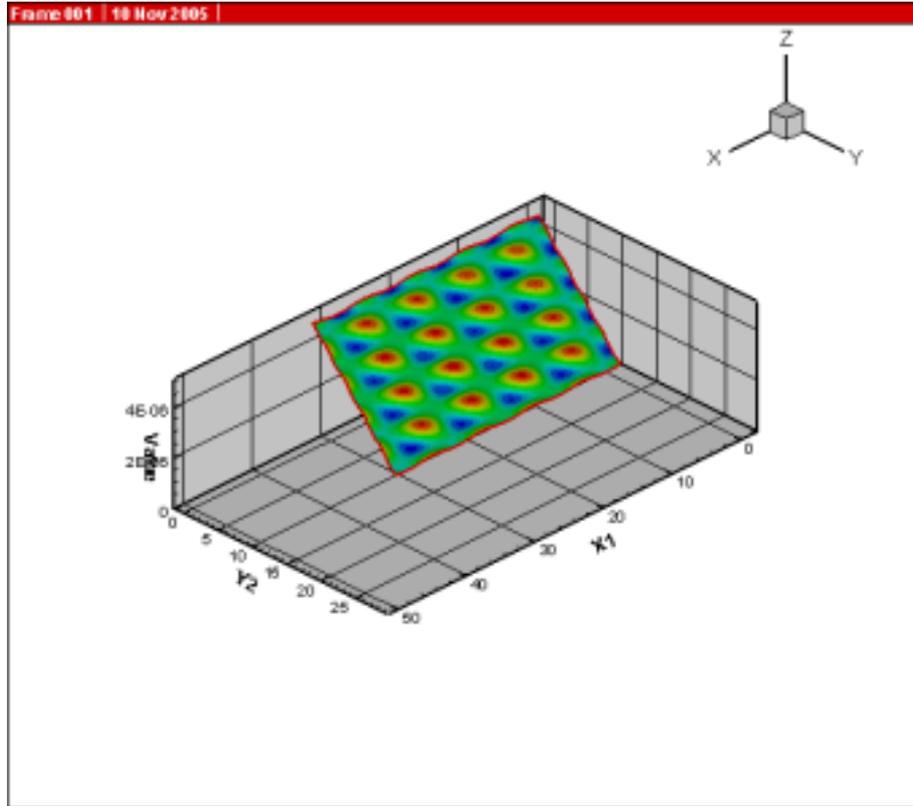
Si(111)_H CBM s_image

水素終端 Si(111)表面から約 5 Å 上方における Conduction band minimum 近傍の電子状態密度。Fermi エネルギーから、上方 1.5eV までの電子状態密度を足し合わせたものを表示している。s-state ライクな STM チップとの間の tunnel 電流に比例する量である。



Si(111)_H CBM s_image with Impurity

水素終端 Si(111)表面から約 5 Å 上方における Conduction band minimum 近傍の電子状態密度。Fermi エネルギーから、その上方 1.0eV までの電子状態密度を足し合わせたものを表示している。表面の下方には、ドナー不純物が埋め込まれている。s-state ライクな STM チップとの間の tunnel 電流に比例する量である。



Si(111)_H CBM d_image with Impurity

水素終端 Si(111)表面から約 5 Å 上方における Conduction band minimum 近傍における以下の量を表示している。

$$\int_{E_F}^{E_F+1.0\text{eV}} 5/4\kappa^{-4} \left| 3\partial_z^2 \psi(\vec{r}) - \psi(\vec{r}) \right|^2 D(\varepsilon) d\varepsilon$$

Fermi エネルギーから、その上方 1.0eV までを足し合わせている。表面の下方には、ドナー不純物が埋め込まれている。d-state ライクな STM チップとの間の tunnel 電流に比例する量である。

