

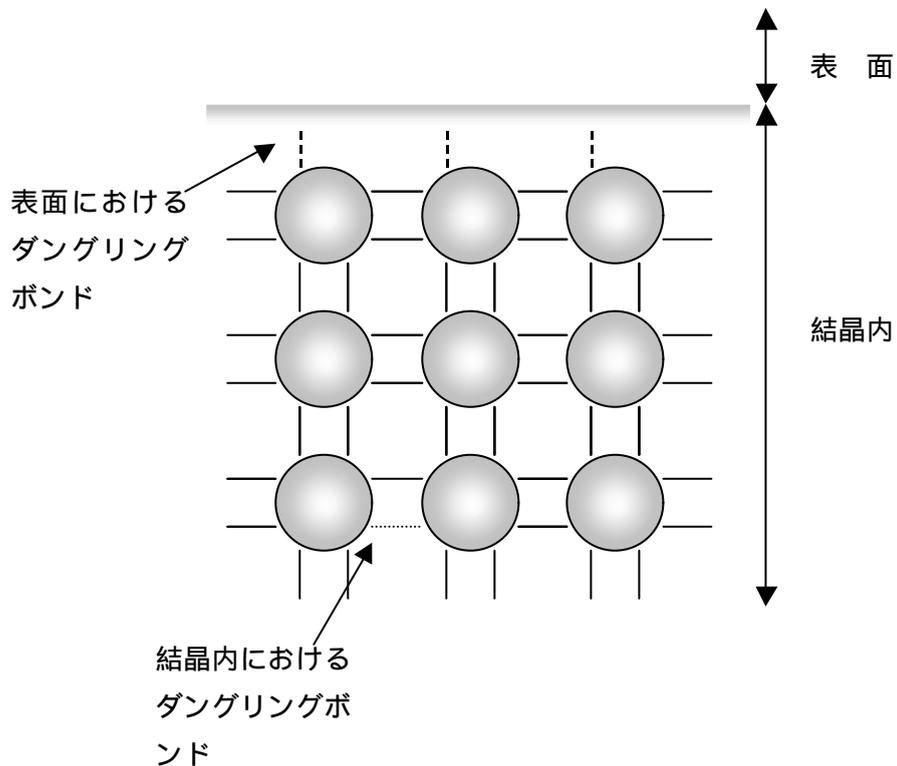
# ダングリングボンド (dangling bond)

西川 和弘

共有結合性結晶では、2つの原子がそれぞれ1つずつ電子を出し合い、その原子対の結合軌道に2つ電子が占めることによって強い安定な結合が生じる（共有結合）。

共有結合性物質において、格子欠陥近傍の原子、あるいは結晶表面の原子は、結合相手を失う。そのため、反応性に富み、不対電子（結合に関与しない電子）が占められている結合手が存在する。このような結合に関与しない結合手をダングリングボンドという。また、ダングリングボンドは、結晶原子における未結合手とも言われる。

表面の原子層では、原子の結合手が完全に切れたものや、多少歪んだりした状態のものもあり、さまざまである。また、表面準位（表面準位）を形成し、それらの表面準位は、トラップや再結合の原因となる。



(図 1) 結晶内における原子の結合状態