

16. GaAs(110)表面内殻励起子による共鳴光電子放出

竹田 康彦

半導体表面では緩和や再構成によって、化学結合軌道及びダングリングボンド(D.B.)の軌道成分の変化と共に電荷の再分布が生じ、その結果全エネルギーが極小化しているような例が多い。GaAs(110)面はその典型的な例であり、表面第1層のGaが沈みAsが浮き上がる表面緩和モデルが多くの実験、理論に支持されている。この緩和の結果GaからAsへ電荷の移動が生じ、AsのD.B.は電子の充満した、GaのD.B.は電子の詰っていない空の状態となっている。この為にGaの内殻(3d)からこのGa D.B.準位に電子が励起される内殻励起子状態が(表面に限って)可能である。

Lapayre と Anderson(L-A)¹ は光電子放出の実験で、この内殻励起子状態を中間状態とする共鳴過程が存在することを示した。しかし共鳴による強度の増大量は $3d \rightarrow$ D.B.の1電子的な光遷移確率とは全くく違った、偏光及び励起エネルギー依存性を示している。偏光依存性については宮本ら²の理論的考察により一応の理解が得られたが、実際の計算に於いては種々の効果が無視されていた。本研究の第一の目的は、宮本らの取扱いで無視された諸効果を正しく取入れて、改めてL-Aの実験結果が上記の表面緩和モデルで説明できるものかどうかを調べることである。又Janowitz と Skibowski(J-S)³は角度分解したCIS、EDCスペクトルを測定した。本研究の第二の目的は、角度分解した光電子強度を計算し、J-Sの実験結果と比較すると共に、これからどのような情報を取り出し得るかを調べることである。

光電子強度の計算には、1. 共鳴放出は励起子の直接再結合のみにより生じ、終状態が同じ価電子直接放出過程と干渉する、2. 表面の構造は原子間の結合距離を変えないままGaが沈みAsが浮き上がる、rotational-relaxationモデルを用いる、3. 励起子状態はGaの同一原子内での $3d \rightarrow 4p$ (D.B.)励起とする、4. 価電子帯は第2隣接までのtight-binding近似で記述し、スピン-軌道相互作用は無視する、5. 光電子状態は単一の平面波からなるものとする、近似及び考察を用いた。

計算の結果、1. L-Aの実験結果に見られた光電子強度の偏光依存性は強度の角度分布の異方性と内部ポテンシャルの効果との組合せで生じること、2. 励起エネルギー依存性は励起子の交換相互作用を考慮することにより理解できること、がわかった。更に、3. 共鳴による強度の増大量は、終状態の価電子帯正孔の波動関数の性質(表面Ga位置での振幅と方向性)にも大きく依存すること、4. 価電子帯のスピン-軌道相互作用を取入れていないにもかかわらず、(内殻状態のスピン-軌道相互作用を通じて)光電子強度にスピン偏極が生じること、が示された。これらの特徴を組合せて、共鳴光電子放出が表面プローブとして非常に有用な手段となることがわかった。

¹G. J. Lapayre and J. Anderson, Phys. Rev. Lett. 35 (1975) 117.

²宮本 良之, 修士論文(阪大基礎工, 1987).

³C. Janowitz and M. Skibowski, private commun.