

## 25. Si(100)再構成表面における2p内殻からの直接光電子放出

山崎 竜 司

Si(100)表面の再構成については、第一層目の原子が二つずつダイマーを形成し、さらに一方の原子が浮き上がり他方の原子が沈み込んで表面に対し傾いた形をした非対称ダイマー構造をしている、という説が多くの理論や実験によって支持されている。

この説が正しければ、表面原子には二種類の電子状態があり、類似した構造を持つGaAs(110)再構成表面での実験結果から推測すると、表面内殻準位はバルクでの準位に比べ浅い側と深い側にシフトした二つの成分が存在するはずである。しかしHimpselらによる2p内殻からの直接光電子放出の実験により得られた光電子スペクトルでは浅い側の表面準位しか確認することができなかった。彼らはこの成分の強度は表面原子数の半分からの寄与に対応していると主張し、非対称ダイマー構造を支持した[1]。一方Richらは別の方法で全表面原子がこの成分に寄与しているという結論を得たが[2]、これは二種類の表面原子が存在するはずの非対称ダイマー構造とは一見相容れず、むしろ対称ダイマー構造に都合がよいと思われる結論である。

我々は、光電子放出過程における終状態の電子的緩和を考慮することで、非対称ダイマー構造と内殻準位シフトの様子とを矛盾なく説明できるのではないかと考え分子軌道法による計算を行なった。すなわち、非対称あるいは対称ダイマー構造の電子的構造を模倣するクラスターモデル(傾き角をパラメータとする)を用い、(closed-shell)Restricted Hartree Fock法及びUnrestricted Hartree Fock法により基底状態と2p内殻イオン化状態についてそれぞれの自己無撞着な解と電気双極子遷移強度を求め、実験と対応する光電子スペクトルを計算し比較を行なった。

その結果、基底状態として(closed-shell)RHF法の解を用いた場合には非対称ダイマーが、またUHF法の解を用いた場合には対称ダイマーが良く実験結果を再現することが分った。

### 参考文献

- [1] F.J.Himpsel,P.Heimann,T.-C.Chiang,and D.E.Eastman ,Phys.Rev.Lett.45,1112(1980)
- [2] D.H.Rich,T.Miller,G.E.Franklin,and T.-C.Chiang ,Phys.Rev.B39,1438(1989)