

$E_B = 1.2 \sim 2.0 \text{ eV}$ $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ の表面ブリリアンゾーンの周期によくあう分散を示す2つの states

$E_B = 0.3 \sim 0.4 \text{ eV}$ あまり分散を示さない1つの state

このうち、 $E_B = 1.2 \sim 2.0 \text{ eV}$ の2つの電子状態は、Northrup²⁾ が T_4 モデル (Al が Si 第1層の hollow site に吸着し、Al 原子の下には Si 第2層原子がくるモデル) に基いて計算した分散と、定性的に一致した。しかし、 $E_B = 0.3 \sim 0.4 \text{ eV}$ 付近の電子状態の由来を説明することはできない。(図) そこで、Al の蒸着量を変化させて、これらの surface states のふるまいを観測した。その結果、Al の被覆量が大きくなると、 $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 構造がまだ残っているにもかかわらず、 $E_B = 0.3 \sim 0.4 \text{ eV}$ 付近のピーク強度は消失した。即ち、この電子状態は $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 構造固有のものではなく、その domain の周りに生じた disorder な構造に由来する可能性が強く、これまでの実験結果から Si (111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ - Al 表面は Northrup の T_4 モデルのような原子配列をとる可能性が高いといえる。

以上の結果を今後の課題も含めて発表する。

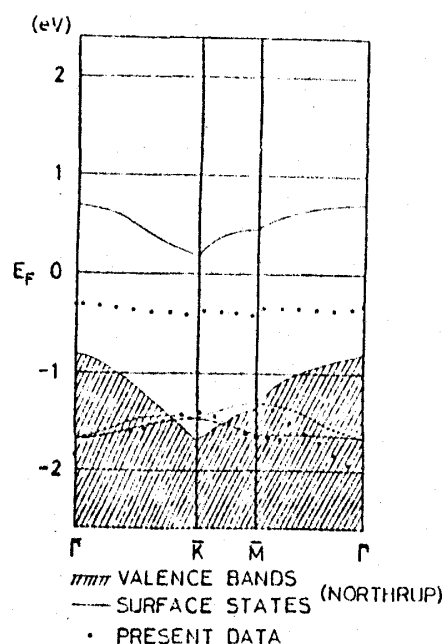


図 Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Al 表面電子状態
実験と理論の比較

- 1) J. J. Lander and J. Morrison, Surf. Sci. 2, 553 (1964).
- 2) J. E. Northrup, Phys. Rev. Lett. 53, 683 (1984).

21. 高角度分解紫外光電子分光法による層状物質 (black P, As, Graphite) の電子構造の研究

東海林 弘

要旨

角度分解紫外光電子分光法 (Angle Resolved Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy; ARUPS) とは、極紫外領域にある単光色を単結晶試料にあて外部光電効果により放出される電子の運動エネルギーと運動量を測定する事により物質の電子バンド構造を直接実験的に決定する方法である。このARUPSを使って擬二次元系とみなせる層状物質の黒リン、Rhombohedral ヒ素、グラファイトの価電子帯構造を実験的に決定し、理論計算との比較を行った。

(1) 黒リン

黒リンは、単体でエネルギーギャップ 0.3 eV の微小ギャップ半導体である。圧力をかけていくと構造相転移を示し、最高圧相は単純立方型の金属となり、超伝導を示す事が知られている。このように黒リンは、物性的にも応用的にも非常に興味深い物質である。最近各種の実験に使用しうる大きさの単結晶が得られ、今回ARUPSの実験を行い、その価電子帯構造を初めて実験的に決定した。図1に黒リンの Brillouin zone を示す。斜線で示したのが測定面である。ARUPS スペクトルのピーク位置と極角の関係から波数ベクトルの表面平行成分 vs 結合エネルギーの分散関数が得られる (図2)。

図2には、同時に朝比奈らによる SCP バンド計算も示した。He I と Ne I の結果は類似し、さらにこれらは、SCP バンド計算と定性的に一致しているのがわかる。

(2) ヒ素

Rhombohedral ヒ素は黒リンと同じV族に属する層状の半金属である。しかも黒リンの中間高圧相である半金属相と同じA7型構造をとる事が知られている。ヒ素のバンド構造は、Falicovらのグループにより既に計算がなされているが、フェルミ面近傍、とりわけL点付近において実験との不一致が見られ長い間論争になっておりまだ決着がついていない。本研究はそのL点付近の問題も含めて実験的に価電子帯構造を決定する目的で行った。

図3に r.As の Brillouin zone を示す。測定は3つの方位面 Γ -L-X 面、 Γ -W-K 面、 Γ -X'-L' 面に対し行った。

バルク中では、 Γ -L-X 面と Γ -X'-L' 面は互いに反転対称性を通して同等であるが、表面では、その対称性が破れるため、光電子放出過程に於いては、必ずしも同等でなくなる。両者のスペクトルを比較すると (図4)、ピーク強度及び角度依存性にかなりの違いが見える。しかし、ピーク位置と極角の関係から実験的にバンドを描くと両者はよく類似している (図5)。この事は、光電子放出過程における momentum broadening の効果が大きい事を示している。

図5には、同時に SCP バンド計算も示した。本測定で SCP バンド計算のようにL点付近で

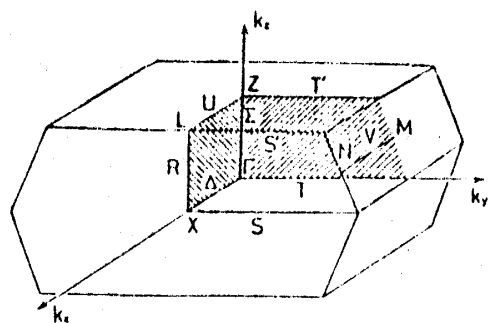


図1
black PのBrillouin zone

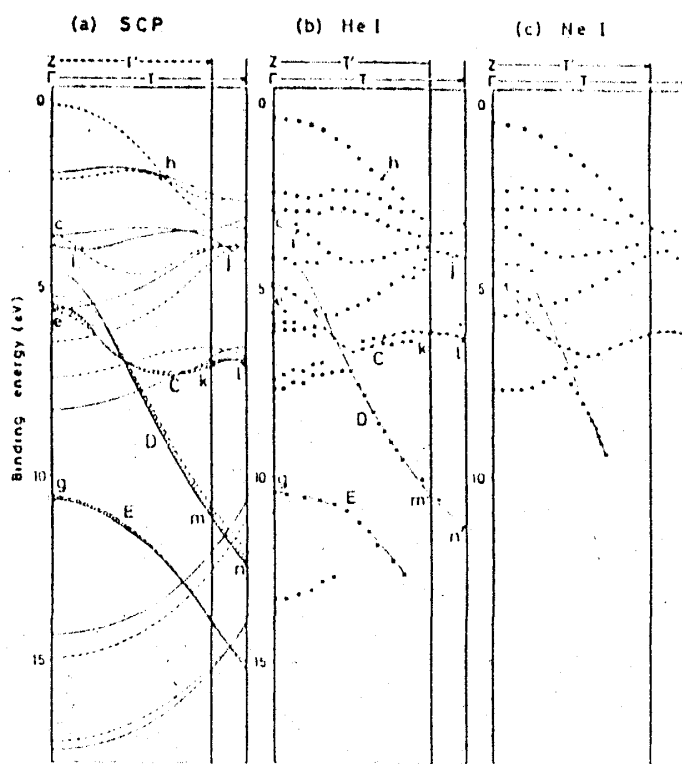


図2 black Pの価電子帯構造

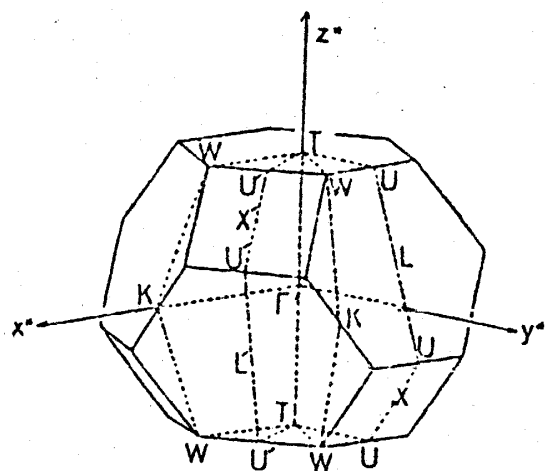


図3
r.AsのBrillouin zone

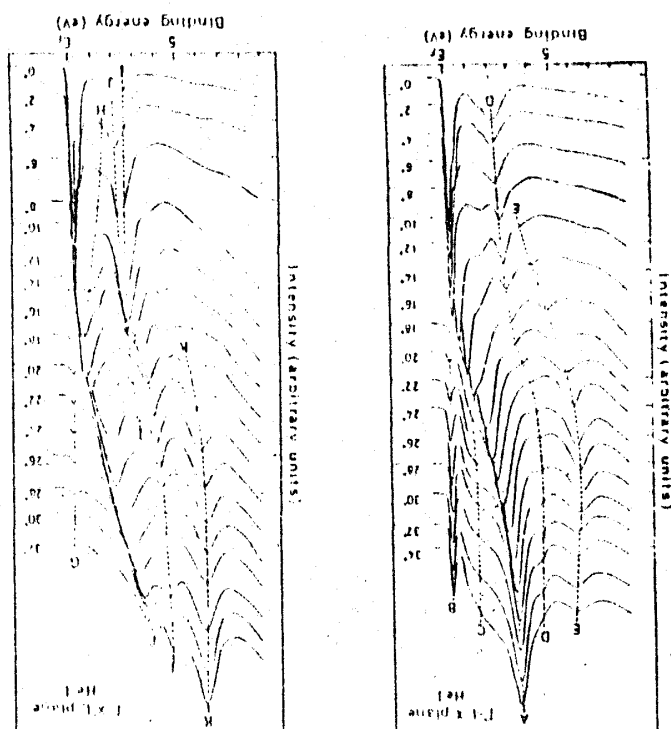


図4 r.AsのARUPSスペクトル
F-L-X面、F-X'-L'面

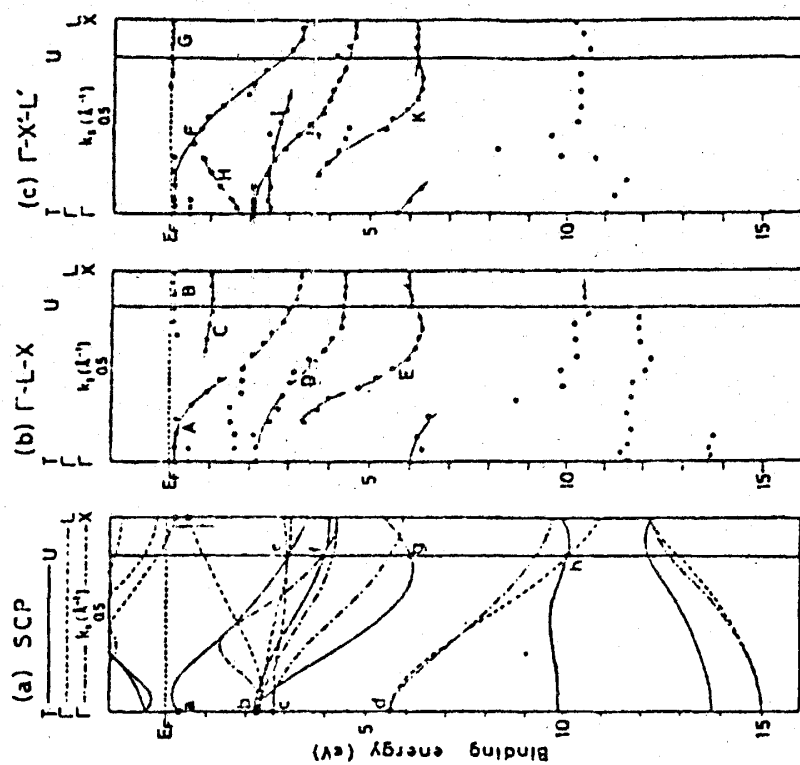


図5 r.ASの価電子帯構造

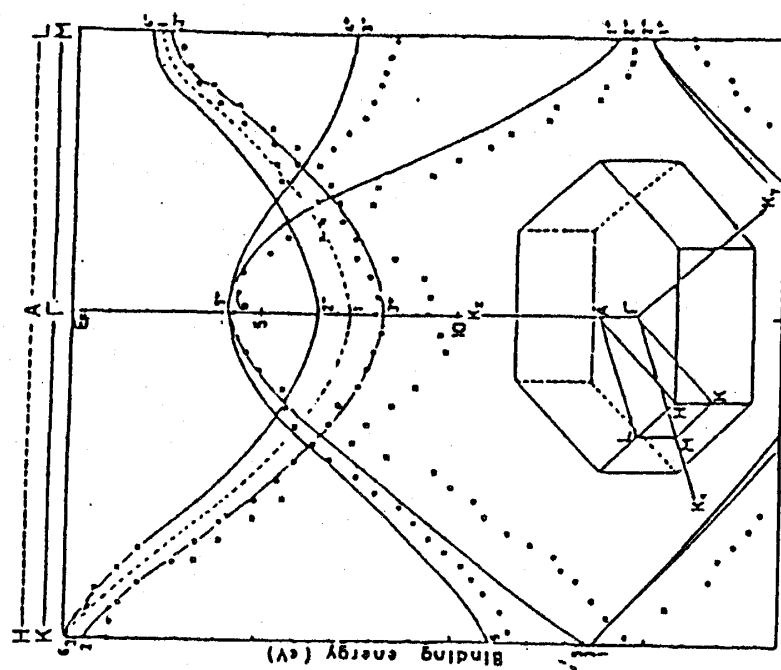


図6 グラフアイトの価電子帯構造

フェルミレベルを切るバンドは1本である事を実験的に確認した。

(3) グラファイト

グラファイトは、典型的な層状物質であり、その価電子帯構造は、理論的によく研究がなされている。

しかし、直接的な価電子帯構造の実験的研究は殆ど行われていなかった。本研究は、最近注目をあびている Graphite Intercalation Compound の物性研究の第一段階として、実験的にその母体たるグラファイトの価電子帯構造を決定する目的で行った。判定はHe I (22.22 eV), He II (40.8 eV) の2つの励起光に対し行った。

図6にHe II で得れたバンド構造を示す。同時に Tatar らによるバンド計算も示す。定性的には全体的に一致しているが、定量的には幾つかの点で不一致が見られる。

発表論文

- 1) “Highly-angle-resolved ultraviolet photoemission study of black phosphorus single crystal”
T. Takahashi, *H. Tokailin*, S. Suzuki, T. Sagawa, and I. Shirotani, *Phys. Rev.* **B29** (1984) 1105.
- 2) “Electronic band structure of rhombohedral arsenic studied by highly-angle-resolved ultraviolet photoelectron spectroscopy”
H. Tokailin, T. Takahashi, T. Sagawa, and K. Shindo, *Phys. Rev.* **B30** (1984) 1765.
- 3) “Electronic structure of black phosphorus studied by angle-resolved photoemission and polarized soft x-ray emission and absorption”
T. Takahashi, Y. Hayasi, *H. Tokailin*, H. Asahina, A. Morita, T. Sagawa, and I. Shirotani, *Proc. 17th Int. Conf. Phys. Semiconductors* (San Francisco, 1984) in press.
- 4) “Electronic band structure of rhombohedral arsenic studied by highly-angle-resolved ultraviolet photoelectron spectroscopy”
H. Tokailin, T. Takahashi, T. Sagawa, and K. Shindo, *Proc. 17th Int. Conf. Phys. Semiconductors* (San Francisco, 1984) in press.
- 5) “Electronic band structure of graphite studied by highly-angle-resolved ultraviolet photoelectron spectroscopy”
T. Takahashi, *H. Tokailin*, and T. Sagawa, *Solid State Commun.* **52** (1984) 765.
- 6) “Electronic band structure of black phosphorus studied by angle-resolved ultraviolet photoelectron spectroscopy”
T. Takahashi, *H. Tokailin*, S. Suzuki, T. Sagawa, and I. Shirotani, *J. Phys. C* (1985) in press.