

8. 角度分解型EELSによるSi(111)の内殻-表面準位間遷移

横 井 亮

角度分解型EELS(電子線エネルギー損失分光法)は準位間遷移を測定し始状態と終状態の結合状態密度を得るものであるが、既知の始状態をとることにより終状態の情報が得られると考えられる。今回はSi(111)7x7清浄表面において2p内殻準位から表面空準位への遷移を測定し、表面空準位の知見を得たので報告する。

図1はSi(111)7x7清浄表面で入射エネルギー400eV,入射角74.0°,〈112〉方位で測定したエネルギー損失スペクトル出射角変化である。入射電子線の表面垂直成分は小さくなっており、表面敏感な入射条件となっている。図1には100~101eVに大きなピークと99eVあるいは98.2eVに小さなピークが現れている。図2に運動量移送の表面平行成分 $q_{\parallel}$ を横軸にそれらのピーク位置をプロットした。98.2eVのピークは(5/7)や(6/7)などの7x7表面逆格子点の回りに、99eVのピークは逆格子点の中間に現れている。また100~101eVのピークも同様に7倍周期の変化が現れている。ピーク位置に7倍周期の変化が現れる原因には二つの可能性が考えられる。一つは表面空準位の7倍周期の分散が現れている可能性であり、もう一つは表面空準位の波動関数の対称性による可能性である。しかしこの準位間遷移の測定では始状態がk空間において広がっているので終状態の分散は測定にかからないと考えられる。そのためピーク位置の7倍周期の変化は一つの準位の分散が現れているのではなく、分散のない複数の準位があり、その準位の波動関数の対称性のために遷移確率が7倍周期で変化して現れると考えている。

始状態には2p内殻準位をとったが2p内殻準位のbinding energyは表面においてバルクの値とは異なる。またadatomと1st full double monolayerでは2p内殻準位のbinding energyは約1eVほど異なる。Photoemissionによって報告されているこれらのbinding energyの値を考慮し、またPhotoemissionやInverse Photoemissionで報告されている表面準位の値と比較してやると98.2eVおよび99.0eVのピークはadatomの2p内殻準位から E_f (フェルミエネルギー)に対してそれぞれ-0.4eV,+0.4eVにある空準位への遷移によるピーク、また100eVおよび101eVのピークは1st full double monolayerの2p内殻準位から E_f に対してそれぞれ+0.4eV,+1.4eVにある空準位への遷移によるピークと考えられる。100eVおよび101eVのピークの強度が他より強いのはadatomと1st full double monolayerの単位格子あたりの原子数の違いによって説明される。またこれらの結果から考察した表面空準位の空間的分布はSTMによるCurrent Imaging法で得られた結果とほぼ一致している。

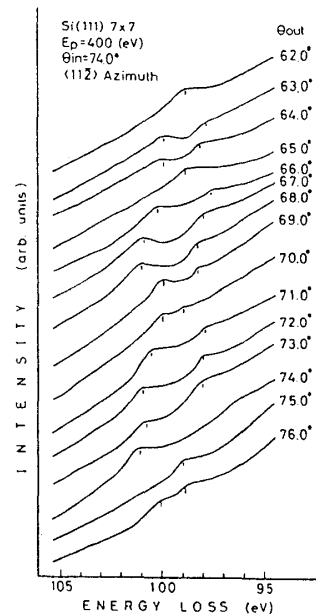


図 1

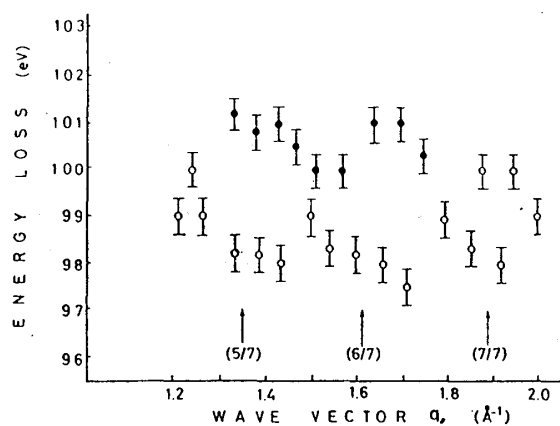


図 2