

逆光電子回折現象:原子構造解析の新技术としても有望

光電子回折・光電子分光は今や物性研究には欠かせない手法である。光電子の角度分布やエネルギースペクトルから固体の原子構造や電子状態の情報が得られる。実際には、固体内では光の侵入長よりも電子の平均自由行程が短く、光電子の大半は非弾性散乱を受け、光電子分光や光電子回折のバックグラウンドを形成する二次電子となる。これまで電子の平均自由行程を見積もるために、プラズモンやフォノン励起過程など非弾性散乱について定量的に調べられてきた。しかし二次電子の角度分布についての研究はほとんど進んでいない。この二次電子の詳細な理解が光電子分光や光電子回折の解釈の信頼性向上に必須である。

結晶にX線をあてると光電子が放出され、その角度分布には局所構造を反映する光電子回折模様が現れる。原子が連なる晶帯軸方向では散乱波同士が強め合い、前方収束ピークが観測される。これまで二次電子の場合、回折模様はプラズモンによるエネルギー損失で消失する、とされてきたが、Hüfner らは前方収束ピークの強度が逆に落ち込む現象を報告している。その原因として原子鎖のブロッキング機構などが検討されてきたが未解決であった。

最近、奈良先端科学技術大学院大学と高輝度光科学研究センターのメンバーを中心とする研究グループは、電子が固体中でエネルギーを失う際、光電子回折の逆過程に相当する経路があることを見出した。独自の二次元電子分析器で二次電子の角度分布を測定したところ、光電子回折と真逆な強度分布が得られることを初めて明らかにした。この成果は、日本物理学会が発行する英文誌 *Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ)* の 2012 年 1 月号に掲載された。

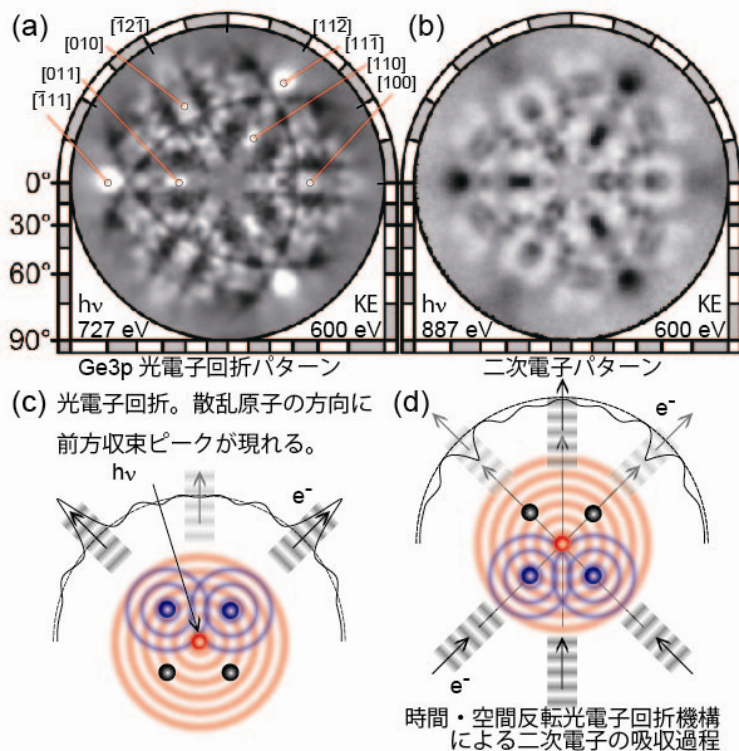


図1. Ge(111)表面からの**(a)**光電子および**(b)**その二次電子の角度分布。運動エネルギーはどちらも 600 eV。**(c)**通常の光電子回折では励起原子から周囲の散乱原子の方向に前方収束ピークという輝点が現れるが、**(d)**二次電子の場合、ちょうど逆の過程で一部が吸収されるので光電子回折の「ネガパターン」が観測される。

図 1 は Ge(111)表面の 3p 準位からの光電子およびその二次電子の角度分布である。電子の運動エネルギーを 600 eV に固定し、励起光エネルギー依存性について調べている。その結果、3p 準位 (図 1 (a)) から 60 eV 離れた二次電子の角度分布では、回折模様が消滅し、さらに 160 eV 以上離れた二次電子の角度分布 (図 1 (b)) では、光エネルギーにかかわらず運動エネルギー 600 eV の内殻の光電子回折模様とほぼ同じでコントラストが正反対のネガパターンが現れることが明らかにされた。「原子鎖によるブロッキング」では光エネルギーにかかわらず 600 eV の光電子回折模様が現れる点が説明できない。この現象の機構は「逆光電子回折過程」による二次電子の吸収というモデルで説明できる。これまでの研究では、励起光エネルギーを固定し二次電子の運動エネルギー依存性について調べられてきたが、励起光エネルギー依存性についての角度分布測定は時間がかかるために行われてこなかった。二次元電子分析器で初めて可能になった研究である。

本研究では二次元角度分布を系統的に測定し、逆光電子回折パターンの強度についても定量的な解析を行っている。光電子回折ではその元素選択性から表面吸着種やドーパント原子周りの局所的な原子サイトの構造解析が可能になる。しかしこうした微量元素解析の場合、こうした二次電子のバックグラウンドの正確な評価と除去が重要となる。

また、円偏光を用いて回折パターンの円二色性についても詳細に解析を行い、「逆光電子回折過程」は偏光と無関係であることを明らかにしている。本研究は軟 X 線励起による解析であるが、この現象は電子励起にも共通する問題である。したがって、電子線を用いて「逆光電子回折パターン」を解析することで、結晶表面の立体原子配列構造が復元できることを示唆している。本研究では、「逆光電子回折パターン」の強度は「光電子回折パターン」のそれの一桁落ち程度であることを明らかにしており、より汎用性の高い電子線を用いた局所原子構造解析の新手法への応用に関しても十分期待できるものである。

論文掲載誌 J. Phys. Soc. Jpn. **81** (2012) No.1, p. 013601

電子版 <http://jpsj.ipap.jp/link?JPSJ/81/013601> (12 月 20 日公開済)

< 情報提供 : 松井 文彦 (奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科)

大門 寛 (奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科) >