

1. はじめに

陽電子は、Diracの相対論的量子力学において、電 子の反粒子として予言され[1]、後にC.D.Andersonに より宇宙線中に発見された[2]。電子と反対のプラス 電荷、電子と同じ静止質量及びスピンを持つこと、電 子と対生成・対消滅することなどは良く知られている。 陽電子が発見されると、その素粒子としての属性や、 β*崩壊におけるスピン偏極性、ポジトロニウム形成 など、特有の現象が明らかにされた。その後、陽電子 消滅を利用して、金属フェルミ面や格子欠陥の研究が 精力的に行われてきた。今日では、陽電子は基礎科学 分野から医学診断まで広範囲に利用されている。

我々の研究グループでは、時空間的にコヒーレント な陽電子ビームを開発することで、陽電子の持つ潜在 能力をさらに引き出し、表面ナノ物性分野における陽 電子の可能性を追求している。

本稿では、これまで行ってきた反射高速陽電子回折 (RHEPD)を用いた表面物性研究及び開発した陽電子 ビームや理論解析手法を用いた表面量子構造の研究を 紹介すると共に、これらの成果を基に平成17年10月よ り新たな研究体制のもとで開始した研究について、今 後の展開を述べる。

2. 反射高速陽電子回折による表面物性研究

物質表面の低次元超構造が示す性質を理解するため には、原子配置や熱振動状態を決定することが何より も重要である。現在では、多くの表面構造解析手法が 開発されているが、どの手法も一長一短であり、単独 で表面構造を決定することは難しい。例えば、電子回 折やX線回折の場合は、表面だけでなく深部の影響も 混在する。走査プローブ顕微鏡では、探針の近接場効 果で原子配列が撹乱される難点がある。

反射高速陽電子回折は、反射高速電子回折 (RHEED)において、電子を陽電子で置換したもので ある。10-20keV程度のエネルギーのビームを使用す る。電子の場合との違いは、陽電子ビームの表面入射 角度がある臨界値以下になると、陽電子が表面で全反 射回折されることである[3]。これは、陽電子の電荷 と陽電子に対する結晶ポテンシャルが正値であること による。全反射回折条件下では、最表面の原子配列と 表面デバイ温度(熱振動振幅)をバルクの状態とは無 関係に決定できる。

我々は、これまで、図1に示すような磁界レンズを 用いた陽電子ビーム装置を開発した。陽電子発生部で は3.7GBqのNa-22線源を使用している。減速材は直 径4mmのタングステン単結晶である。減速材から放 出された単色陽電子ビームが、直後にクロスオーバ点 を形成することでエミッタンスが低減するように、多 段円孔電極を配置している。静電レンズと比べて磁界 レンズの場合には収差が小さいので、輸送系ではビー ム収束が効果的にできる。フラックス約10⁴e*/sec、エミ ッタンス0.98 π mm mrad、輝度10⁷e*/sec/cm²/rad²/V の陽電子ビームを得ている[4]。

その結果、これまでは不可能であった各種の表面超 構造に付随する回折パターンが観測できるようにな り、表面超構造研究への道が拓かれた。ここで、回折



図1 (a) 開発した磁界収束型陽電子ビーム装置の概略、(b) ビーム発生部の電極構成と軌道シミュレーション(ウェネ ルト電極近傍にクロスオーバー点が形成される)、(c) ビーム位相図及びビーム像(直径1mm程度)。

スポットの現れる位置自体は、基本的に電子回折の場 合と同様であるが、その強度分布は電子の場合とは異 なることが分かってきた。一例として、Si(111)-7×7 の場合について述べると、図2に示すように、回折ス ポットがシャープに見える電子回折の場合とは異な り、陽電子回折パターンはかなり散漫である。これ は、主として熱振動振幅の大きい最表面原子で陽電子 が回折するためと考えられる。実際、同図に示すよう に、回折強度の温度依存性から求めた表面デバイ温度 を考慮すると、観測結果が良く再現できることが分か った[5]。

表面超構造に起因する回折パターンが観測できるようになったことで、その原子配置と相転移に関する研究も可能になった。図3は、Si(111)-7×7表面への銀吸着により形成されるSi(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag表面について得られた回折スポット強度の温度変化を示してい



図2 Si (111)-7×7表面の反射高速陽電子回折パターン 及び反射高速電子回折パターン。(左)実験、(右) 最適原子配置及び熱振動振幅を用いたシミュレー ション。

る。各回折スポット強度は、116Kを境にして不連続 に変化している。即ち、臨界温度T_c=116Kで相転移が 起こっている。これまで、Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag表 面の相転移は、低温相の非等価三角格子 (InEquivalent Triangle, IET)構造から高温相の蜂巣 鎖結合三角格子 (Honeycomb-Chained-Triangle, HCT)構造への構造相転移であると解されてきた。し かし、図3に示される回折強度の温度変化は、構造相 転移によって説明することはできない。我々は、動力 学回折理論を用いた詳しい解析の結果、この温度変化 がIETに付随する位相の異なる二つの等価な構造間の 秩序無秩序相転移であることを解明した[6]。

3. 陽電子ビームによる表面量子構造の研究

陽電子は元々原子空孔やマイクロボイドに敏感なプ ローブとして用いられてきたが、母相と整合界面を持 つ場合は、量子ドットや量子井戸にも捕獲される。こ の場合、陽電子消滅特性から、量子構造の内部と電子 状態に関する知見が得られる。我々は、これまでエネ ルギー可変低速陽電子ビーム(エネルギー:0.1~ 30keV)と低エネルギー短パルス陽電子ビーム(時間 分解能:250ピコ秒)を開発するとともに、陽電子状 態の第一原理計算手法を整備してきた。これにより、 表面量子構造の研究が可能になった。

図4は、酸化膜(SiO₂)/SiCの界面層(数nm幅の二次

元量子井戸)に陽電子を注入することで得られた電子 の運動量分布である。ただし、スペクトル形状変化を 分かりやすくするために未処理SiCのスペクトルにて 差分をとっている。特徴的なことは、電子運動量が p=15mrad付近の強度が非常に強いことである。これ は、一つには界面層が並進対称性を持たない電子状態 であるため第二ブリュアン帯のバンド折り返し構造が 消失していることが考えられる。しかし、それだけで ここに見える強いピークを説明することはできない。 即ち、陽電子消滅相手の電子がSiやC以外、即ち、Oの 価電子と消滅していると考えざるを得ない。第一原理 計算との対比から、非晶質SiO²中にSi原子空孔を導入 したモデルによって実験結果が良く説明できることが 明らかになった[7]。

陽電子ビームを用いた表面物性研究の今後の展開

上述したように、輝度の高い陽電子ビームを開発し たことで、反射高速陽電子回折法による表面超構造の 研究が可能になった。現在、表面物性分野では、各種 の表面超構造の相転移が精力的に研究されている。従 来から知られていた構造相転移や秩序無秩序相転移の 他に、電荷密度波(CDW)を形成する表面超構造があ ることが最近になって分ってきた。この場合、金属-絶縁体転移が伴うことから、物性上も注目を集めてい



図3 Si (111)-√3×√3-Ag表面による陽電子回折強度 の温度依存性。右図は、各温度で得られた回折パ ターン。



図4 SiO₂/SiC界面について得られた電子運動量分布 (●)。非晶質SiO₂、非晶質中のSi空孔、及びSiO₂空 孔に対して第一原理的に計算された電子運動量分 布。

る。今後の計画では、このような新しい相転移に付随 する構造変化を解明し、表面物性に与える影響を探 る。また、反射高速陽電子回折の表面敏感性を利用し て、金属表面融解の検出を試みる。

反射高速陽電子回折を用いて、表面物性研究を一層 展開するためには、一方で陽電子と固体表面の相互作 用に関する理解を深める必要がある。特に、陽電子の 非弾性散乱に関する問題は重要である。これまでの研 究を通じて、陽電子が表面で回折するときに起こるプ ラズモン励起などの非弾性散乱効果は、電子の場合と 比較して非常に小さいことが示唆されている。原子殻 からクーロン斥力を受ける陽電子の場合には、内殻電 子励起断面積が低下することも明らかになってきた。 そこで、今後の計画では、陽電子マイクロビームやエ ネルギーフィルターを開発して、回折陽電子線の絶対 反射率やエネルギー損失スペクトルを決定し、非弾性 散乱過程を解明する。

陽電子ビームを用いた研究では、各種の次元の量子 構造による陽電子消滅現象を観測するとともに、第一 原理的な計算手法を併用して、電子状態や構造を解明 する。また、マイクロビームを用いた微小試料や局所 構造の評価技術を開発する。 さらに将来的には、これまであまり利用されていな かったスピン偏極性などの属性を利用して磁性表面研 究などへの展開などを模索する予定である。

参考文献

- P. A. M. Dirac, Proc. Cambridge Phils. Soc. 26, 361(1930).
- [2] C. D. Anderson, Science 76, 236(1932).
- [3] A. Ichimiya, Solid State Phenom. 28&29, 143(1992/93).
- [4] A. Kawasuso, T. Ishimoto, M. Maekawa, Y. Fukaya, K. Hayashi and A. Ichimiya, Rev. Sci. Inst.75, 4585(2004).
- [5] K. Hayashi, A. Kawasuso and A. Ichimiya, Surf. Sci. (in press).
- [6] Y. Fukaya, A. Kawasuso and A. Ichimiya, e-J. Surf. Sci. Nanotech. 3, 228(2005).
- [7] M. Maekawa, A. Kawasuso, M. Yoshikawa, A. Miyashita, R. Suzuki and T. Ohdaira, Phys. Rev. B (in press).

