

共鳴オージェ電子分光によるポリジメチルシランの非占有電子状態の研究 Unoccupied Electronic states of polydimethylsilane studied by Resonant Auger Spectroscopy

小川博嗣^{1,*}, 池浦広美¹, 関口哲弘²

¹産業技術総合研究所 分析計測標準研究部門 〒305-8568 つくば市梅園 1-1-1

²日本原子力研究開発機構 物質科学研究センター, 〒319-1195 那珂郡東海村白方 2-4

Hiroshi OGAWA^{1,*}, Hiromi IKEURA-SEKIGUCHI¹, and Tetsuhiro SEKIGUCHI²

¹National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), Tsukuba, Ibaraki 305-8568, Japan

²Japan Atomic Energy Agency (JAEA), Tokai-mura, Ibaraki 319-1195, Japan

1 はじめに

ポリシランは、主鎖構造が 1 次元 Si-Si 結合で構成される σ 共役高分子であり、 σ 電子が Si 主鎖に非局在化しているため、特徴のある電子特性や光学特性を持つことが知られている。本研究では、ポリジメチルシランの Si K 吸収端における X 線吸収分光および Si KLL 共鳴オージェ電子分光によりフェルミ準位近傍の非占有電子状態について調べた。また、ポリジメチルシランの伝導帯の電子移動特性を調べるため、共鳴オージェ電子分光において励起エネルギー依存性の測定も行った。

2 実験

実験は KEK-PF の BL-27A ビームラインで実施した。偏向電磁石からの放射光を InSb(111)二結晶分光器で単色化し、Si K 吸収端近傍の X 線吸収分光を試料電流法で計測した。また、共鳴オージェ電子分光は電子分析器 (CLASS-100; Vacuum Science Workshop (VSW)) を使い、パスエネルギー 44eV にて測定を行った。試料はポリジメチルシラン粉末を導電性カーボンテープにマウントしたものを用いた。

3 結果および考察

Si K 吸収端近傍のポリジメチルシランの X 線吸収スペクトルを図 1 に示す。1840 – 1848 eV のエネルギー領域では、3 個の共鳴ピーク (A-C) が存在する。各ピークの帰属を行うため、DV-X α 分子軌道計算を行い、実験値と比較した。その結果、ピーク A、C は Si 1s 軌道から σ^* (Si-C) 非占有軌道への共鳴励起およびピーク B は Si 1s 軌道から σ^* (Si-Si) 非占有軌道への共鳴励起と同定した[1]。これらの帰属はポリシラン配向試料の X 線吸収測定の結果[2,3]と一致している。

また、共鳴オージェ電子分光により競合する 2 つのオージェ過程であるスペクテータオージェ過程 (図 1 ○) およびノーマルオージェ過程 (図 1 □) の収量の励起エネルギー依存性を測定した結果、イオン化連続エネルギーより低エネルギー側のピーク

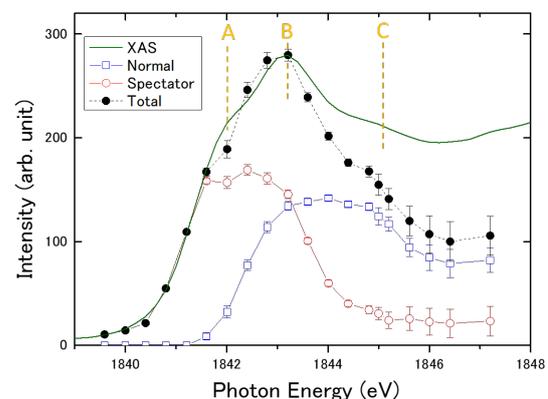


図 1 : ポリジメチルシランの X 線吸収スペクトル (XAS) および共鳴オージェ電子の収量スペクトル

B で非局在化していることが観測された。このことは Si 主鎖に沿って伝導帯が形成されていると解釈できる。さらに内殻正孔時計法を適用し、ピーク B において競合するオージェ過程の収量比から Si 1s 内殻励起電子の非局在化時間が 1.5 fs と見積もられた。

4 まとめ

ポリジメチルシランの非占有電子状態について Si 1s の X 線吸収分光および Si KLL 共鳴オージェ電子分光を用いて研究を行った。測定した X 線吸収スペクトルを DV-X α 分子軌道計算との比較により帰属した。また、共鳴オージェ電子分光の励起エネルギー依存性の測定により、Si 1s 内殻励起による電子が伝導帯中を Si 主鎖に沿って高速に非局在化することを示唆する結果が得られるとともに内殻正孔時計法を用いて電子の非局在化時間を評価した。

参考文献

- [1] H. Ogawa *et al.*, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **622**, 164 (2015).
- [2] M. A. Mannan *et al.*, *J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom.*, **181**, 242 (2010).
- [3] V.R. McCrary *et al.*, *J. Chem. Phys.* **88**, 5925 (1988).

* ogawa.h@aist.go.jp