

# 陽電子回折への期待 Expectation for positron diffractions

高橋敏男<sup>1</sup>  
Toshio Takahashi<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Institute for Solid State Physics, University of Tokyo, Kashiwa, Chiba 277-8581, Japan.

\*e-mail: [ttaka\(at\)issp.u-tokyo.ac.jp](mailto:ttaka(at)issp.u-tokyo.ac.jp)

Abstract: X-ray diffraction is, in principle, a powerful tool to study the structure of surfaces and interfaces. Practically, however, X-ray diffraction technique encounters difficulties in determining the structures in some cases because atomic layers deep inside the specimen contribute to the diffraction. Positron diffraction is, in contrast, quite sensitive to the topmost layer. From this point of view, possibilities of positron diffraction are discussed.

我々は、これまで表面X線回折法により表面・界面の研究を行ってきた。X線回折法では、散乱現象を運動学的回折でほぼ完全に記述できる。このため、X線散乱振幅と原子配列（電子密度分布）はフーリエ変換の関係で結びつけることができるので、精度の高い実験データを取得することができれば、原理的には、表面X線回折法により、表面界面の構造を曖昧さ無く決定できる。しかし、現実問題としては、以下の例で述べるように、解析が困難な場合がある。

一般に、回折法で表面構造を決定する際の大きな問題点の1つは、2次元単位格子の大きさは回折スポットの出現角度から容易に知ることができるが、単位格子に含まれる原子数が分からない点である。たとえば、吸着構造の場合には被覆率が直ちには分からないこと、さらには、単位格子の体積、即ち、その周期構造が表面からどの程度の深さまで及んでいるかが不明な点である。

陽電子回折 (RHEPD, LEPD) の特徴は、X線回折はもちろん電子回折 (RHEED, LEED) に比べても表面に極めて敏感である点である。この表面に極めて敏感な特性を利用すれば、深さ方向に複雑に変化するような構造でも、表面層だけを選択的に決定できる可能性がある。特に、単位格子が大きな構造の場合には、極めて有効である。

ここでは、一例として、単位格子が大きな Si(111)- $\sqrt{21} \times \sqrt{21}$ -(Ag+Au) 構造について触れる。我々は、微小角入射X線回折法による測定を行い、表面投影構造を求めることを試みた [1]。Fig. 1 は、

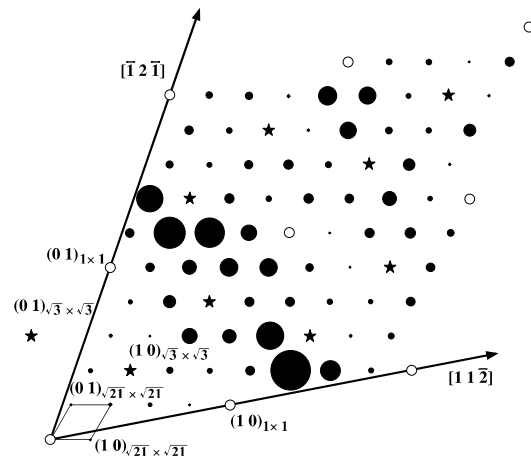


Fig. 1. Diffraction intensities observed for Si(111)- $\sqrt{21} \times \sqrt{21}$ -(Ag+Au). Open circles, asterisks and filled circles correspond to the in-plane reciprocal lattice points of the  $1 \times 1$ ,  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  and  $\sqrt{21} \times \sqrt{21}$ , respectively.

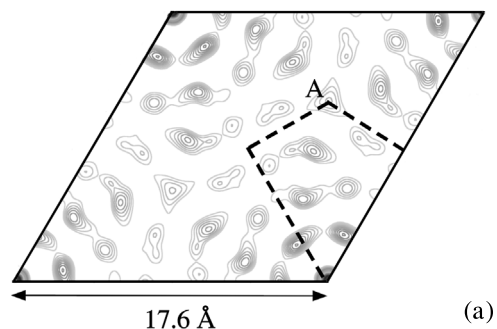


Fig. 2. Patterson map obtained from the observed intensities shown in Fig.1, using only the spots peculiar to the  $\sqrt{21} \times \sqrt{21}$  periodicity.

in-plane 回折で観測された回折スポットを回折強度が面積に比例するように表示したものである。Fig. 2 は、Fig. 1 に示した  $\sqrt{21} \times \sqrt{21}$  に固有な回折スポット強度から計算されたパターンマップである。この測定データに基づき、構造モ

デルの決定を試みたが、最終結論までは至らなかった。

その理由としては、Fig. 2 に A で示されたピークに相当する原子間ベクトルがあり、Fig. 1 の回折強度分布を説明できる構造が、それまでに提案されていた構造モデル[2, 3, 4]では説明できなかったからである。その後も、いつかの研究がなされているが[5]、未だに完全には理解されているとは言えない。このように、単位格子が大きく、深さ方向にも複雑に変化していることが予想される構造では、その最表面の構造を選択的に決定できる意義は大きく、陽電子回折に期待するところが大きい。

次に、低速陽電子回折では、垂直入射の配置で回折パターンを観測できるので、表面構造の対称性を直ちに知ることができ点に着目したい。X線回折でも、透過型の配置で対称性の高い回折パターンの観測を試みられているが、散漫散乱がバックグラウンドとなり、試料を薄くするなどの工夫が必要になる[6]。

他方、データ解析においては、holography の手法は、光電子回折[7]、低速電子・陽電子回折[8]などで利用されてきたが、近年、表面X線回折でもその有効性が示されている[9, 10]。陽電子回折でもその手法をさらに発展させ、表面層の構造をモデルフリーに決定できるようになることを期待したい。

## References (参考文献)

- [1] H. Tajiri *et al.*: *Surf. Sci.* **493**, 214 (2001).
- [2] J. Nogami *et al.*: *Surf. Sci.* **306**, 81 (1994).
- [3] A. Ichimiya *et al.*: *Surf. Rev. Lett.* **1**, 1 (1994).
- [4] X. Tong *et al.*: *Surf. Sci.* **408**, 146 (1998).
- [5] Y.. Fukaya *et al.*: *Surf. Sci.* **601**, 5187 (2007).
- [6] H. Tajiri *et al.*: *Appl. Surf. Sci.* **234**, 403 (2004).
- [7] J.J. Barton : *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1356 (1988).
- [8] S.Y. Tong *et al.*: *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3654 (1992).
- [9] T. Takahashi *et al.*: *Surf. Sci.* **493**, 36 (2001).
- [10] T. Shirasawa *et al.*: *Phys. Rev. B* **84**, 075411 (2011).