

二次元光電子分光による 価電子帯立体分散図と原子軌道解析

奈良先端科学技術大学院大学 物質創成科学研究科 松井 文彦

物質の原子同士を結び付ける価電子は、分子では分子軌道を、固体ではバンド分散を形成している。物質の化学特性や電子物性はこうした「価電子の運動（電子構造）」によって決定される。角度分解光電子分光法は「価電子の運動」を立体的に観る手法である。従来は、立体角の小さな分析器を用いて色々な位置でその方向の電子の運動量とエネルギーを測定する方法で行われてきた。しかし、この方法で全立体角の情報を得ようとする時間がかかるので、通常は対称性の良い方向でのみ測定が行われている。それに対し、全立体角の情報を一度に得よう、というのが二次元分析器である。

二次元表示型分析器を用いて価電子帯領域からの光電子角度分布を測定していくと三次元的なバンド分散や等エネルギー面が得られる。こうして得られる二次元のバンド構造の情報は、これまでよりはるかに豊潤である。光電子角度分布に始状態の対称性が反映されるので、励起光源に放射光の直線偏光を用いることで、バンドを構成している電子がどのような電子であるか（原子軌道の帰属）、また、どのように結合しているか（結合の係数）などまで詳しく知ることが可能になる。そうして原子軌道の形や電子の運動を立体的に観ることで、表面の電氣的・磁氣的・光学的・化学的な諸性質を議論することができるようになる。これは簡単に言えば、「物性に寄与する電子の動き」だけでなく「どのような軌道の電子が物性に寄与しているか」、つまり「誰が主役か」が分かるということである。

現在、立命館大学 SR センター直線偏光ビームライン BL-7 に二次元検出器を設置、また奈良先端大にて高分解能型の二次元検出器を立ち上げ、種々の結晶のバンド構造や、結晶表面の電子状態を調べてきた。本研究会ではこうした価電子帯の立体分散測定と原子軌道解析の例を第一原理計算と比較しながら紹介する。