

放射光 X 線回折による表面界面の三次元原子イメージング

Imaging atoms at surfaces and interfaces by synchrotron X-ray diffraction

高輝度光科学研究センター¹ ○ 田尻 寛男¹JASRI/SPring-8¹ ○ Hiroo Tajiri¹

E-mail: tajiri@spring8.or.jp

固体表面界面や、そこに生成する低次元物質の構造や物性を研究対象とする表面構造物性分野では、ラシュバ効果表面、トポロジカル絶縁体表面、表面低次元系（表面一次元鎖）といった話題物質において、電子状態は分光手法で良く調べられているが、その確かな幾何構造が分からないため、理論計算による現象説明が十分でない例が多くみられる。

一方で放射光表面回折では、構造モデル依存型の解析手法が主であるので、上記話題表面には解析が困難なものも多い。そこで、結晶学的直接法といったモデルフリーな構造解析手法を表面構造解析の切り札として実用化し、利用分野を大きく拡大したいと考え、実験技法と解析手法の両側面から研究開発・高度化に取り組んでいるので、それを紹介する。

実験技法上の観点からは、表面界面の原子層一層からの回折・散乱は、バルク結晶の回折シグナルより三桁以上弱く、反射率で 10^{-11} 以下の微小シグナルであり、依然として、高フラックスが求められている。これまで、放射光硬 X 線の分光では、高分解能化が主眼に置かれていたが、放射光表面回折においてはむしろワイドバンド化を検討すべきであり、SPring-8 の共用ビームライン BL13XU（表面界面構造解析ビームライン）では、表面回折に適したワイドバンド型の高フラックス分光結晶として Si(111) 非対称分光結晶を導入し、利用ビームの高フラックス化を実現した。プリズム型集光レンズとの組み合わせからなる高フラックス光学系で、10 keV から 15 keV 領域では、0.1 mm サイズビームで 10^{13} ph/s を超えるフラックスを安定供給できている。さらに、迅速な表面回折計測を実現するために透過表面回折法 [1] の開発を進めている。

一方、面内周期性を有する結晶表面界面の原子イメージング法、いわゆる、モデルフリー構造解析法の研究開発も進めている。このモデルフリーな表面構造解析法は、表面に由来する CTR（結晶切断ロッド）散乱をホログラムと見なす CTR 散乱ホログラフィ [2] の原理を応用したものである。図 1 に、理想的な CTR 散乱データ（計算）を使った場合の、Pd/Si(111) 表面層の原子イメージング結果を示す。実測データを使った結果ではないが、表面層の周期構造を三次元的に可視化できていることがわかる。新光源においても、確かな幾何構造情報が得られる点が放射光表面回折の大きな利点であることに変わりはない。モデルフリー構造解析法が普及すれば、電子状態計算との密な連携が可能となり、研究対象の総合的な理解へと繋がると考えられる。他の計測手法では見えない界面の構造についても同様である。

[1] 田尻寛男、高橋敏男、日本放射光学会誌 22 (2009) 131.

[2] T. Takahashi *et al.*, *Surf. Sci.* **493** (2001) 36.

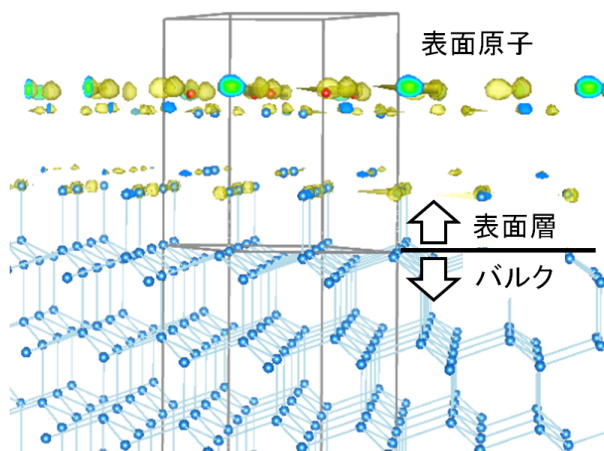


図 1: Pd/Si(111) の表面原子イメージング（計算）