

# 低速原子散乱分光法による BaF<sub>2</sub>(111)表面第 1 層分子の緩和観察

## Observation of topmost BaF<sub>2</sub> (111) molecule relaxation using

### low energy atom scattering spectroscopy

大阪府大<sup>1</sup>, 東工大<sup>2</sup> °福田 浩昭<sup>1</sup>, 梅澤 憲司<sup>1</sup>, 吉本 護<sup>2</sup>

Osaka Pref. Univ.<sup>1</sup>, Tokyo Institute of Technology.<sup>2</sup>, °Hiroaki Fukuta<sup>1</sup>, Kenji Umezawa<sup>1</sup>,

Mamoru Yoshimoto<sup>2</sup>

E-mail: fukuta@las.osakafu-u.ac.jp

#### 1. はじめに

低速原子散乱分光法を用いて絶縁体である BaF<sub>2</sub>(111)表面構造について研究を行った。試料は、15mm×15mm ×t1 mm サイズの BaF<sub>2</sub>(111)単結晶であった。入射粒子は、100kHz にパルス化された 3 keV-<sup>20</sup>Ne<sup>0</sup> であった。実験は、入射粒子を試料に衝突させ、180° 後方散乱された粒子を MCP で検出し行った。得られたスペクトルは、飛行時間分解型である。なお、実験実施にあたり、入射粒子の多重散乱効果による影響を回避するため <sup>4</sup>He<sup>0</sup> に替えて 3keV-<sup>20</sup>Ne<sup>0</sup> 粒子を用いた。

#### 2. 結果とまとめ

最初に試料全体について散乱強度マッピングを行い、結晶方位を決めた。その後に $[\bar{1}10]$  及び $[11\bar{2}]$ 方位について入射角と散乱強度との関係性について調べた。入射角は、試料表面に対して垂直方向をゼロ度とした。散乱強度は、入射角±90.0° の範囲で 2.0° ごとに測定をした。その結果、図 1 に示す通り BaF<sub>2</sub>(111)表面は、第 1 層表面から第 3 層表面に関して F-Ba-F の原子の順番に配列していることがわかった。さらには、第 1 層分子 (F-Ba-F) 全体が、第 2 層以下の分子に対して、0.2Å 外側へ緩和していることもわかった。これは、実験結果である。裏付ける理論については、今後の検討となる。当日は、第 1 層分子の表面緩和について議論を行いたい。研究の実施にあたり株式会社パスカ TOFLAS-3000 を使用させて頂いたこと及び、長澤裕樹氏、中西繁光博士に感謝致します。

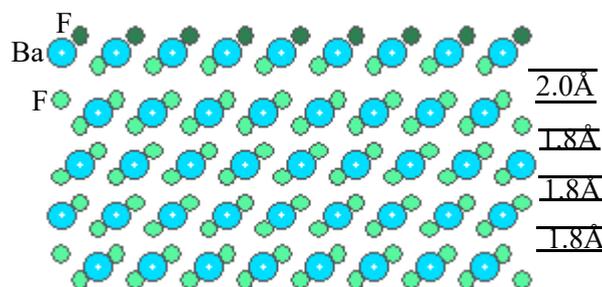


図 1 BaF<sub>2</sub>(111)表面原子モデル、 $[11\bar{2}]$ 方位.