

SiF₄ の Si 1s 励起オーজে遷移の研究(愛媛大理¹・東北大多元研²・JASRI³・KEK/AIST⁴・広島大理⁵)○ 河野優太郎¹・池田明広¹・大井正則¹・大内孝雄²・樋口格³・鈴木功⁴
為則雄祐³・上田潔²・高橋修⁵・長岡伸一

1. はじめに

内殻電子を励起すると、続いて正孔緩和がおこりオーজে崩壊または蛍光 X 線放射が起こる。放出されるオーজে電子の運動エネルギーは緩和過程やそれに関与する軌道のエネルギー等に依存する。

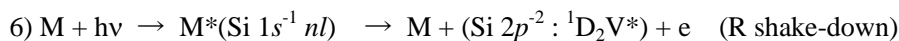
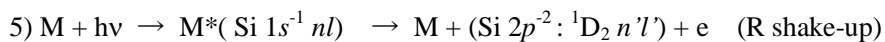
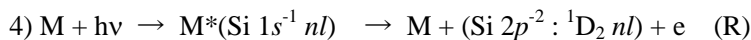
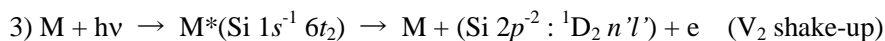
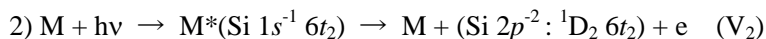
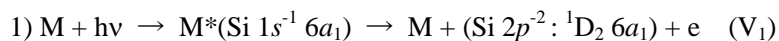
SiF₄ 分子の Si 1s 領域での全イオン収量スペクトル(TIY)では、2つの大きなピークと禁制遷移による微小なピークが得られた。我々は *KLL* 共鳴オーজেや *KLL-LVV* カスケードオーজে電子スペクトルの測定を行い、SiF₄ 分子の Si 1s 励起状態と一連のオーজে過程の解明を行った。

2. 実験

実験は放射光施設 SPring-8 の BL27SUc ブランチで行った。電子の検出には静電半球型電子エネルギー分析装置(SES-2002,Gammadata Scienta)を用いた。光の分解能は 0.53 eV、検出器の分光器の分解能は、*KLL* 共鳴オーজে電子スペクトルは 0.5 eV、*KLL-LVV* カスケードオージェスペクトルで 0.47 eV である。

3. 結果と考察

図 1 は気相 SiF₄ 分子に水平偏光の光を照射し放出された電子を観測し得られた、横軸に放出電子の運動エネルギー、縦軸に放射光エネルギーをとり、SiF₄ において放出される電子の励起光エネルギーと電子の運動エネルギーの関係を表した Si *KL*₂₃*L*₂₃ オージェの 2 次元スペクトルである。右端のスペクトルは TIY であり、実線は実験により得られるスペクトル、点線は DFT 法による計算から得られるスペクトルである。影付きの線は Si 1s イオン化閾値を表している。実験値と計算値は良く一致しており、はじめに示したように 2 つの大きなピークと禁制遷移による微小なピークが得られた。2 次元スペクトルの主なピークのオーজে過程は以下に示すように表される。



ここで、*nl* はリユードベリ軌道を、*V**はσ*軌道を表している。

2 次元スペクトルの測定により、TIY ピークでは、オーজে終状態が 2*p*² の二価正孔状態 ¹D₂ の傍観型オーজে遷移が圧倒的優勢に起こり、第 1 ピークはσ*軌道への共鳴励起後の傍観型オージェや shake-up 過程を伴うオージェ電子放出が、第 2 ピークではリユードベリ軌道への共鳴励起

後の傍観型オージェや shake-up、shake-down を伴うオージェ電子放出が起こることがわかった。また、運動エネルギー約 1595 eV に NA で示される縦長いピークはノーマルオージェによるものである。このピークの下部に見られる傾きは post collision interaction による。また照射光が垂直偏光の 2 次元スペクトルも同様の結果が得られ、 KL_1L_{23} 共鳴オージェの同様の測定においても V_2 、 V_2 shake-up、R、R shake-up と、かすかではあるが R shake-down に対応するピークが得られた。また主なピークの性質を表 2 に示す。

また Si $KLL-LVV$ カスケードオージェスペクトルでは参与型オージェの特徴的なピークの外、複雑なスペクトルが得られた。詳細については当日報告する。

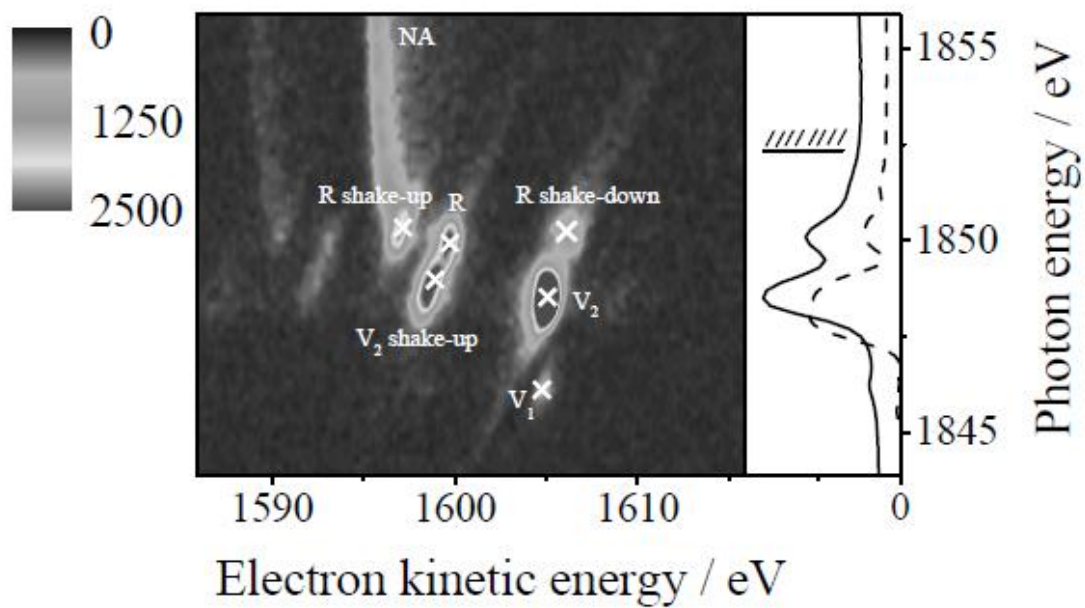


図 1 SiF₄ の Si $KL_{23}L_{23}$ 共鳴オージェ電子 2 次元スペクトル

表 1 2 次元スペクトル (図 1)中の主なピークの励起光エネルギー(E_{PR})と運動エネルギー(E_{RA})とその状態での項値(T_{neu} は $1s$ 励起状態、 T_{ion} はオージェ終状態を表す)。 n は電子励起後の軌道の主量子数、 n^* は有効量子数、 δ は量子欠損。

Symbol	E_{PR} / eV	T_{neu} / eV	n^*	n	δ	E_{RA} / eV	T_{ion} / eV	n^*	n	δ
V_1	1846.1	6.2	---	---	----	1604.8	15.7	---	---	----
V_2	1848.5	3.8	---	---	----	1605.1	13.6	---	---	----
V_2 shake-up	1848.9	3.4	(2.0)	4	2.0)	1598.8	6.9	2.8	5	2.2
R	1849.9	2.4	2.4	4	1.6	1599.7	6.8	2.8	5	2.2
R shake-up	1850.3	2.0	2.6	4	1.4	1597.1	3.8	3.8	6	2.2
R shake-down	1850.2	2.1	2.5	4	1.5	1606.1	12.9	(2.1)	4	(2.0)