

2P17

第二周期元素を含む物質のオージェ電子スペクトルの理論的解析

(金沢大院自然) 高木裕介、加藤謙一、井田朋智、遠藤一央

takagi@wiron1.s.kanazawa-u.ac.jp

【序】 X線を用いた内殻電子の分光法の一つであるオージェ電子スペクトルは、物質の最表面の分析手法として非常に利用価値が高く、固体表面の汚染、酸化、拡散、組成、吸着や深さ方向の元素分布の測定などに広く用いられている。これまで実験によって多くの物質についてのスペクトルは得られているが、そのスペクトルについての電子相関を考慮に入れた理論的な解析例は少ない。そこで本研究では、第二周期元素であるC、N、O、Fを含む固体物質(graphite、GaN、SiO₂、LiF)について密度汎関数法を用いてAESの理論的解析を行う。

【理論】 オージェ電子のエネルギーはgeneralized transition state (GTS)モデル及びJanakの理論から以下のように表される。

$$E_{cjk} \approx I_c - I_j - I_k^* - WD$$

ここで、 I_c は内殻電子結合エネルギー(CEBE)、 I_j はrestricted generalized diffusional ionization (rGDI、 $\frac{F_i(0) + 3F_i(2/3)}{4}$)、 I_k^* はAuger rGDI (A-rGDI、 $\frac{F_i(1) + 3F_i(5/3)}{4}$)、WDは仕事関数を含んだ固体効果のエネルギーである。ただし、

$$F(\lambda) = \partial E(\lambda) / \partial \lambda$$

$$E(\lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k E_k = E_0 + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2 + \lambda^3 E_3 + \dots$$

である。また、相対強度は以下のように表される。

$$M_{cjk} = N' \sum_{\mu, \nu} |C_{\mu j}|^2 |C_{\nu k}|^2 P_{c\mu\nu}$$

ここで、 $|C_{\mu j}|^2$ 、 $|C_{\nu k}|^2$ はそれぞれ原子軌道 ψ_μ と ψ_ν のelectron density populationsであり、 $P_{c\mu\nu}$ はsubshell Auger transition probabilities[1]である。

【計算方法】 モデル分子として、各物質の単位格子を用い、deMon DFTプログラムを用いて計算した。交換相関ポテンシャルとしてB88/P86を用い、基底関数としてFについてはcc-PVTZ、Liについてはdouble- ζ を用いた。シミュレーションスペクトルは、各輝線スペクトルについてガウス型分布関数の重ね合わせとし、線幅は3.0 eVとした。

【結果】 図1に、LiFのF原子についてのオージェ電子スペクトルを示す。今回のシミュレーションによって、実験のKVV'スペクトルのピークを低エネルギー側から1s-2s2s、1s-2s2p、1s-2p2pの遷移に分類することができた。

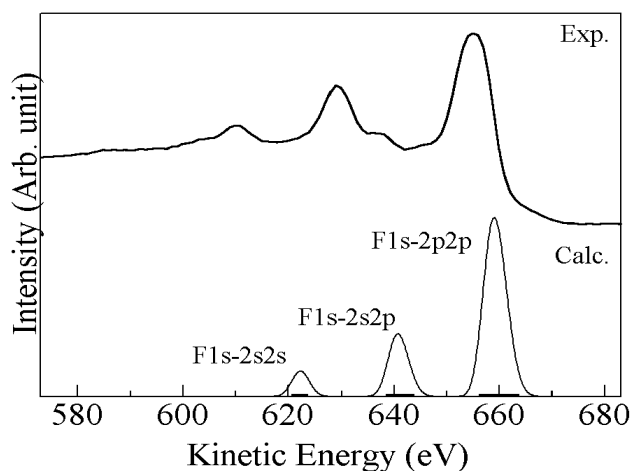


図1 LiFのAES(上:実測 下:理論)

[1] M. H. Chen, F. P. Laukins, B. Crasemann, At Data Nucl Data Tables 1990 (45) 1