

## 光電子分光法による Sb(111)の 3次元電子状態

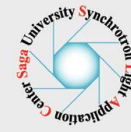
今村真幸、藤木祐真、高橋和敏、鎌田雅夫  
佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター

特異な電子およびスピン状態への興味から近年盛んに研究が行われてきた Sb 表面の価電子帯電子状態は表面平行方向については詳細に明らかにされている一方で、表面垂直方向のバンド分散については実験的にはほとんど明らかになっていない。そこで本研究では佐賀大学ビームライン(BL13)において、放射光のエネルギー可変性を利用した光電子分光測定を行い、スペクトルの励起エネルギー依存性について検討を行うことで Sb(111)表面の表面垂直方向におけるバンド分散を明らかにした。得られた光電子イメージから $\Gamma$ 点近傍のスペクトルを抽出することで表面垂直方向のバンド分散を反映した光電子イメージを作成した。光電子イメージの励起エネルギー依存性において、表面垂直方向の始状態および終状態のバンド分散を反映した複数の周期的構造を観測し、直接遷移モデルを用いた詳細な解析を行うことにより得られたバンド構造に対する、以前に報告のあった理論計算との比較によって、表面垂直方向における始状態および終状態のバンド構造を実験的に明らかにした。

---

# 光電子分光法による Sb(111) の 3 次元電子状態

今村真幸, 藤木祐真, 高橋和敏, 鎌田雅夫  
佐賀大学シンクロトロン光応用研究センター



## Introduction

V 族半金属である Bi や Sb は表面状態が特異な電子状態・スピン状態を示すことから、その物性が広く調べられてきている  
特に、Sb(111) 表面表面平行方向の電子状態については ARPES により明らかにされている一方で、表面垂直方向の電子状態については理論的な報告があるのみで、実験的に明らかにした例はない。  
角度分解光電子分光：励起エネルギーを変化させながら測定することで、表面平行方向だけでなく、表面垂直方向のバンド分散について明らかにすることができる

Bi をバッファ層として Si 基板上に作成した Sb 表面の表面垂直方向のバンド分散について、放射光のエネルギー可変性を利用した角度分解光電子分光測定を行い、Sb(111) 表面 3 次元バンド構造について知見を得ることを目的とする

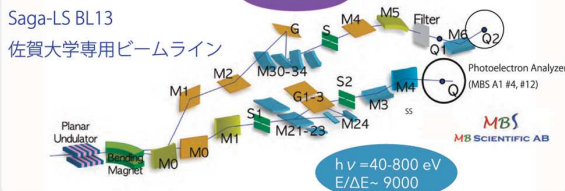
## Experimental Methods

### - Sb(111)/Bi/Si の作成

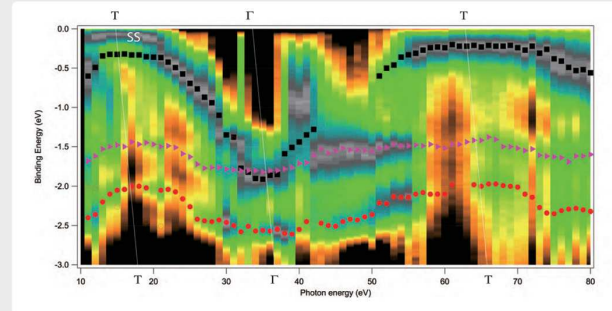
Si(111) flashing at 1200°C  
Si(111)7x7 上へ Bi を蒸着した後、Bi(111)/Si へ Sb を蒸着

### - 放射光による角度分解光電子分光

Saga-LS 佐賀大学専用ビームライン PGM ステーション  
励起エネルギー:  $h\nu = 10\text{--}80\text{ eV}$  (1eV step), 測定温度 35K



## Excitation Energy Dependence of ARPES



- ノーマル方向近傍の角度分解光電子強度を励起エネルギーの関数としてプロット
- 表面状態は低エネルギーによる励起において顕著に観測
- 結合エネルギー  $-0.5\text{ eV}$  以下においてバルクバンドからの Primary cone emission と Secondary cone emission による、終状態バンドを反映した周期的なスペクトル構造  
→ 周期構造から  $\Gamma\text{T}$  ( $k^{\perp} = 0.85\text{ \AA}^{-1}$ ) 方向の終状態バンドを決定し、ブリルアンゾーンの対称点を実験的に決定  
 $\Gamma$  点:  $33.8\text{ eV}$  T 点:  $14.9\text{ eV}, 58.3\text{ eV}$  (in final energy:  $E_F = E_i + \hbar\omega$ )

- 直接バンド間遷移を仮定、自由電子モデルにより終状態バンドを記述、占有電子状態の表面垂直方向の波数を決定

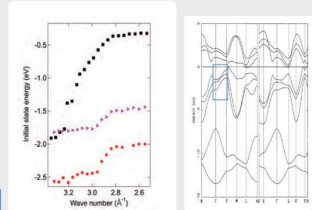
$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_{\perp} - G_{\text{surf}})^2 + V_0$$

$m^*$ : 有効質量,  $k_{\perp}$ : 固体中の波数ベクトル  
 $G_{\text{surf}}$ : 逆格子ベクトル,  $V_0$ : 内部ポテンシャル

- ブリルアンゾーンの対称点で始状態バンドが極大もしくは極小となるように有効質量と内部ポテンシャルの値をフィッティング →  $m^* = 0.99$ ,  $V_0 = 13.8\text{ eV}$

## Band Dispersion Along $\Gamma\text{T}$ Direction

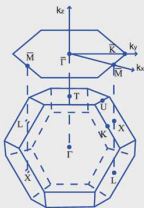
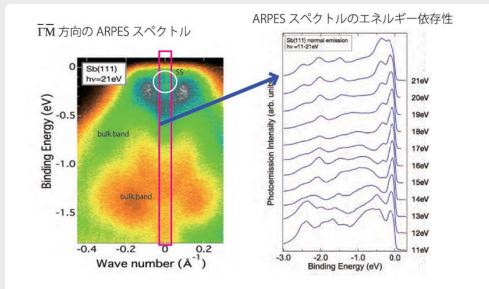
- ARPES スペクトルの励起エネルギー依存性  
→ 表面垂直方向 ( $\Gamma\text{T}$  方向) における 5p バンドのバンド分散を決定
- スピン軌道相互作用を考慮した Tight Binding モデルによる計算結果との比較  
→ エネルギー位置は異なるものの、バンドの形状がよく一致



	$E_{x^2-y^2}$	$E_{x^2+y^2}$	$E_{z^2}$	$T_{x^2-y^2}$	$T_{x^2+y^2}$	$T_z$
this work	-1.82	-1.9	-2.56	-0.32	-1.45	-2
Y. Liu et al., Phys. Rev. B 52 1566 (1995)	-1.45	-1.76	-2.68	-0.33	-0.81	-1.25
Y. Sato et al., Phys. Rev. B 68 075404 (2003)	-1.22	-1.5	-2.25	-0.26	-0.9	-1.33

Sb(111) の Tight-Binding モデルによる計算  
Y. Liu et al., Phys. Rev. B 52 1566 (1995).

## Angle-resolved Photoemission Spectra



- $\Gamma\text{M}$  方向の ARPES スペクトル  
→ 表面平行方向における、以前の報告と一致した表面電子状態および価電子帯 5p バルクバンドを観測
- ノーマルエミッション近傍の ARPES スペクトル  
→ 複数のバンド構造の励起エネルギーに依存したシフトを観測  
これらの励起エネルギー依存性について詳細に検討することで、表面垂直 ( $\Gamma\text{T}$ ) 方向のバンド分散を明らかにする

## Conclusion

シンクロトロン光のエネルギー可変性を利用した角度分解光電子分光測定により、Bi(111) をバッファ層として、Si(111)7x7 上に成長させた Sb(111) の表面垂直方向のバンド分散について実験的に明らかにし、理論計算との比較を行った。

- ノーマルエミッション近傍における光電子スペクトルの励起エネルギー依存性  
→ 周期的な電子構造の変化を観測、ブリルアンゾーンの対称点を決定  
終状態を自由電子モデルにより記述  
→  $\Gamma\text{T}$  方向における価電子帯バンド構造を得、実験的に得られたバンド構造を過去に報告のあった Tight-Binding 法による理論計算と比較した結果、良い一致が見られた