新しい2次元表示型球面鏡分析器の解析*

大門 寛**・井野 正三**

(昭和63年8月1日 受理)

Analysis of a Newly Developed Display-type Spherical Mirror Analyzer

Hiroshi DAIMON and Shozo INO

(Department of Physics, Faculty of Science,
The university of Tokyo, Bunkyo-ku, Tokyo)

(Received August 1, 1988)

A display type spherical mirror analyzer was newly developed and its nature was analyzed in detail. It consists of an inner hemispherical grid, an outer hemispherical electrode whose radius is two times large as that of the inner grid, a small aperture, and two dimensional detector. Only the charged particles with the same kinetic energy can exit through the aperture and the angular distributions of them are observed by the two dimensional detector. The characteristics of the analyzer are (1) the acceptance cone is ultimately wide (2π sr), (2) the pattern obtained is not distorted, and (3) the structure of the components are very simple and easy to construct. The loci of the charged particles, the resolution of the analyzer, and the flight-time of the particles were analytically expressed.

1. はじめに

物理や化学の多くの分野に於て、ある点から出る荷電粒子の放出角度分布を測定することは基本的に重要である。電子回折はもとより、そのほかにも例えば、光電子の角度分布の測定によるエネルギーバンドや吸着位置の決定、光や電子励起による脱離イオンの方向の測定による表面原子位置の決定、交差ビーム法における微分断面積の測定、などがある。しかしながら、従来は2次元分布をパターンとして見ることは難しかった。ほとんどの場合の測定方法は、小さな立体角のエネルギー分析器を用い、ある角度でのエネルギースペクトルを測定してあるピークの強度を見積り、次に検出器を動かして違う角度での強度測定をし、それらをつなぎ合わせて角度分布を知るということであった。この方法では時間がかかり、2次元のパターン認識は不可能であった。Eastman¹⁾は回転楕円面を用いた複雑な装置で2次元測定を可能にし

た。しかしながら、この方法では像が歪んでおり、あまり広い立体角が取れず、製作が困難であるなどの欠点があるためにほとんど普及しておらず研究例も少ない。

そこで我々は、それらの困難を解決するために新しい原理に基づき「あるエネルギーの粒子の角度分布を2次元像として表示する分光器²⁾」を製作した。この分析器は、角度分布を表示する際、Eastmanのものと異なり像が全く歪まずに全立体角を測定できる。また、単に角度積分型のエネルギー分析器として使用するときには 2π ステラジアンという究極の明るさを持っているため、これまでの最高であるEastmanのものよりもさらに6倍も明るく、通常の角度分解型の分析器と比べると実に8000倍も明るい。また、製作が容易である、など数々の利点がある。これまでの実験により、エネルギー分解能は計算どおりになり、角度分布も正しく保存されていることが確認されている³⁾。

ところで、軌道が後述のように集束するという付いてはSar-Elが1966年に発表していた⁴⁾ことが後に判明した。彼は今回のような詳しい解析は行っていないが、分光器として使用したときの分解能については

* 63年4月1日日本物理学会講演会において講演

** 東京大学理学部物理学教室 (東京都文京区本郷7-3-1)

簡単な計算をしている。しかし、彼は一番分解能の悪い方向で近似式を計算してしまったために分解能を実際より相当悪く見積ってしまい、分光器としては機能しないと考えた。そこで彼は分光器として機能させるために、立体角を広く取ることは諦め、取り出す角を制限するスロットを設けたり、電極の間にスリットを入れるなどの提案をしている。しかしながら、これは近似式を用いたための誤りであり、実際には分光器として働くだけの分解能がある。また、この分光器の最大の長所は、角度分布が保存されることである。即ち2次元検出器に映る像は全く歪んでいない。Sar-Elはこのことに気付かなかったのか言及していない。この長所を活かすためには分解能を犠牲にしても立体角を広く取って2次元検出する必要があるが、実際には後で述べるように立体角を広く取った方が分解能が上がるので益々広く取るべきである。但しこの場合には中心付近で分解能が悪いという欠点が残るが、ここでは紙面の都合上、また基本的でないので詳しくは述べられないが中心付近だけに効くような障害リングを入れ、また阻止電位グリッドを入れることで改良することが出来、全立体角で1%程度の分解能が得られている³⁾。従って、本研究は、広い立体角に於て歪まない像を得られる2次元表示型の分光器を、初めて提供したものであると言える。

本報告では、次章でこの新しい分光器の概要を述べた後、3～5章で軌道の詳しい解析を行い、この分光器の基本的な特徴と、応用例として質量分析への可能性について述べる。

Fig. 1 A schematic cross-sectional view of the new analyzer. G is a hemispherical grid, D, an outer hemispherical electrode, GR, guard rings, S, a sample, A, a small exit aperture, M, a pair of microchannel plates, and P, a phosphorous screen. The position of S and A are symmetric with respect to the center O. e is an electron gun, which is used to test the focusing effect by a LEED pattern.

2. 分析器の概要

本章では新しく製作した分光器の概念を述べる。

Fig. 1のように、構成は、半球型のステンレス製グリッドG、半径がGの2倍の半球型のアルミ製電極D、電場補正のガードリングGR、直径1～2 mmφのアパチャーA、及び2次元検出器(M, P)からなる。製作した分光器のGの半径は7.5 cmである。試料SとアパチャーAは半球G、Dの中心Oについて対称な位置に置く。試料Sから、一定のエネルギーEを持って出た電子を分析するときは、Gを接地しておき、Dに $-E$ (V)の電位をかける。すると、いろいろな方向に出た電子は、次章で説明するように図のような軌跡を描きAに厳密に集束する。Aを通過した電子は、マイクロチャンネルプレートMで増幅され、蛍光スクリーンPによって観測される。この時、Sから出た角度と、Aに入ってくる角度は厳密に等しく保存されているので、Pの上で角度分布を測定すれば、Sから出たときの角度分布を歪み無しに観測することが出来る。

エネルギーの異なる電子は**Fig. 2**のような軌跡を描くので集束せず、アパチャーAをほとんど通り抜けられない。このような集束非集束の効果によりエネルギー分析が行われる。また、エネルギーの高い粒子は**Fig. 2(b)**のように外球に衝突することによって戻ってこられないことによってもエネルギー分解能が上がる。エネルギー分解能は、試料上の電子が出る領域とアパチャー

Fig. 2 The paths of particles whose kinetic energies are (a) 0.9 and (b) 1.1 times the corrected energy.

Fig. 3 Inverse of the resolution $E/\Delta E$ vs s/a . The peak width ΔE is the FWHM. The estimated results are shown by the solid and broken lines, for the aperture size A with 1% and 2% of a , respectively. The results by Sar-El⁽⁴⁾ for 1% aperture is also shown by a dotted broken line.

の位置と大きさに依存する。計算機によるシミュレーションの結果を Fig. 3 に示す。横軸は、試料及びアパチャーの中心 O からの距離 s とグリッドの半径 a との比 (s/a) である。試料及びアパチャーを中心から遠ざげるに従って分解能は良くなり、アパチャーの大きさが a の 1% で $s/a=0.9$ のときに 1/100 程度になり、通常分光器と同程度となる。図には、比較のため Sar-El が 1% のアパチャーで見積った値を 1 点鎖線で示す。Sar-El は、実際よりかなり低く見積ったことが判る。

角度分布が保存されていることを確認する目的で行った LEED の実験結果を Fig. 4 に示す。電子銃は Fig. 1 の e の所に入れている。電子線のエネルギーは 200 eV である。試料は 7×7 構造になっている Si (111) 清浄面である。Fig. 4 に示すように、 7×7 の LEED パターンがきれいに観測されている。基本格子反射点が 6 角形状に並んでおり、角度分布がきれいに保存されていることがわかる。外側の列が外側にたわんでいるのは球面を平面に投影したためのものであり、基本的には問題が無い。

3. 軌道の解析

Fig. 5 において、 G は半径 a のグリッドであり接地されているものとする。 D は半径 b の電極であり、電圧 $-V$ (V) がかけられているものとする。図のように中心 O からの距離 s の点 S から、 OS と α の角度をなして出た電子の軌跡を考える。 G の内部の空間 F は自由空間なので、 S から出た電子は L までは直線軌道を描く。

Fig. 4 A LEED pattern for a Si(111) 7×7 surface at the electron energy of 200 eV.

Fig. 5 A locus of an electron emitted from S . The region F inside the grid G is a free space. The region B between G and D is a coulomb field.

G と D の間の空間はクーロン場であり、中心の O からの距離 r の所での電界 $E(r)$ は

$$E(r) = \frac{ab}{b-a} \frac{V}{r^2} \quad (1)$$

で与えられる。この中で電子の運動は、ケプラーの法則で記述される。アナライザーとして役立つのは図の LMN のような軌道を描きまた F の中に戻ってきて、 OS の延長と T で交わるような楕円軌道のものである。速度 v 、運動エネルギー E の粒子についての式は、運動方程式を解くと、

$$r = \frac{s^2}{a} \eta \sin^2 \alpha / \{1 - \xi \cos(\theta - \theta_M)\} \quad (2)$$

となる。ここで、

$$\xi = \left[1 + \eta(\eta - 2) \frac{s^2}{a^2} \sin^2 \alpha \right]^{1/2} \quad (3)$$

$$= [1 + \eta(\eta - 2) \sin^2 \beta]^{1/2} \quad (4)$$

$$\theta_M = \alpha + \omega$$

$$\tan \omega = (\eta - 1) \frac{s \sin \alpha}{\sqrt{a^2 - s^2 \sin^2 \alpha}} = (\eta - 1) \tan \beta \quad (5)$$

$$\eta = v^2/v_0^2 = E_k/E_0 \quad (6)$$

$$E_0 = \frac{1}{2} m v_0^2 = \frac{beV}{2(b-a)} \quad (7)$$

である。(7)式の e は素電荷である。ここで、 v_0 、 E_0 は、(1)の電場がグリッドの所まで広がっているとしたときに、半径 a で円運動するような電子の速度とエネルギーである。

(3)~(5)のように、グリッドへの入射角 β を使って表すと式が簡単になる場合が多いので、適宜 β の式を用いる。この性質は、クーロン場の中の軌道は入射角 β とエネルギー η が決まれば一義的に決ってしまうことによっている。 α と β の関係は、

$$\sin \beta = \frac{s}{a} \sin \alpha \quad (8)$$

である。また、Mは軌道の中でOから一番離れた点であり、 θ_M はOMとOSのなす角である。

ところで、楕円

$$\frac{x^2}{a_0^2} + \frac{y^2}{b_0^2} = 1 \quad (9)$$

の、焦点F($-ae$, 0)を極とする極方程式は、

$$r = \frac{l}{1 - e \cos \theta} \quad (10)$$

$$= \frac{b_0^2}{a_0} \left\{ 1 - \left[1 - \frac{b_0^2}{a_0^2} \right]^{1/2} \cos \theta \right\} \quad (11)$$

で表される。ここで l は通径(Fを通り長軸に垂直な弦)の半分の長さ、 e は離心率である。(2)式を(11)式と比較すると、

$$b_0 = s \sin \alpha \eta / \sqrt{\eta(2-\eta)} \quad (12)$$

$$a_0 = a / (2-\eta) \quad (13)$$

とおけば、両式は等しくなることが分かる。従って、(2)式は

$$\text{長径} : a / (2-\eta) \quad (14)$$

$$\text{短径} : s \sin \alpha \eta / \sqrt{\eta(2-\eta)} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \text{離心率}(\xi) : [1 + \eta(\eta-2) \frac{s^2}{a^2} \sin^2 \alpha]^{1/2} \\ = [1 + \eta(\eta-2) \sin^2 \beta]^{1/2} \end{aligned} \quad (16)$$

$$\text{回転角}(\theta_M) : \alpha + \omega \quad (17)$$

$$\tan \omega = (\eta - 1) \frac{s \sin \alpha}{\sqrt{a^2 - s^2 \sin^2 \alpha}} \quad (18)$$

$$= (\eta - 1) \tan \beta \quad (19)$$

の楕円を表している。Oは楕円の焦点であるので、OMは長軸であり軌道はOMに関して対称になる。OMの長さ $r_{\max}$ と $\angle \text{MOL}$ ($=\theta_M - \theta_0 \equiv \epsilon$)は、

$$r_{\max} = \frac{s^2}{a} \eta \sin^2 \alpha / (1 - \xi) \quad (20)$$

$$\epsilon = \cos^{-1} \{ (1 - \eta \sin^2 \beta) / [1 + \eta(\eta-2) \sin^2 \beta]^{1/2} \} \quad (21)$$

で表される。Tでの入射角 γ と、OTの長さ t は、

$$\gamma = \alpha + 2\omega \quad (22)$$

$$t = s \sin \alpha / \sin(\alpha + 2\omega) \quad (23)$$

となる。

η が1の場合には、(14)から(23)は簡単になり、

$$\text{長径} : a \quad (24)$$

$$\text{短径} : s \sin \alpha \quad (25)$$

$$\text{離心率}(\xi) : [1 - \frac{s^2}{a^2} \sin^2 \alpha]^{1/2} = \cos \beta \quad (26)$$

$$\text{回転角} : \alpha \quad (\omega = 0) \quad (27)$$

$$r_{\max} = a(1 + \cos \beta) \quad (28)$$

$$\epsilon = \beta \quad (29)$$

$$\gamma = \alpha \quad (30)$$

$$t = s \quad (31)$$

となる。式(30)から、Sから出る角とTに入る角は s や α によらず厳密に等しく、SL//TNであることが判る。

また、(31)から、Sから出た電子は出射角 α によらずにSと中心Oについて対称な点Tに厳密に集まることが判る。また、(28)から $r_{\max} \leq 2a$ となるので、外球の半径 b は $2a$ としておけば、通したいエネルギーの粒子は衝突しないことが判る。このとき、外球にかかる電圧 V (V)とパスエネルギー E (eV)との関係は簡単になり、

$$V = E \quad (32)$$

となる。

4. エネルギー分解能

全体としての分解能はFig. 3に示した通りであるが、この分析器においては、分解能は出射角 γ によって大きく変化する。実際に得られる画像を見ていると、分解能の悪い所ではバックグラウンドが高くなり、S/Nが悪い。この節では、分解能の近似式を求め、分解能の出射角依存性について述べる。

(23)式より、

$$t = s \frac{\sin(r-2\omega)}{\sin \gamma} \quad (33)$$

となる。ここで、 ω が小さいので展開して整理すると、

$$\Delta t \equiv s - t = 2s \left(\omega \frac{\cos \gamma}{\sin \gamma} + \omega^2 + \dots \right) \quad (34)$$

ところで、(19)式より、 ω が小さいときには

$$\omega \approx \frac{\Delta E}{E_0} \frac{s \sin \gamma}{\sqrt{a^2 - s^2 \sin^2 \gamma}} \quad (35)$$

となるので、

$$\Delta t = \frac{2s^2 \cos \gamma}{\sqrt{a^2 - s^2 \sin^2 \gamma}} \left(\frac{\Delta E}{E_0} \right) + \frac{2s^3 \sin^2 \gamma}{a^2 - s^2 \sin^2 \gamma} \left(\frac{\Delta E}{E_0} \right)^2 \quad (36)$$

となる。この式から、 $\gamma = 90^\circ$ では初項が0となるため1次の分散が無く、2次の項から始まるために分解能が悪くなっていることが判る。(36)を解くと

$$\frac{\Delta E}{E_0} = \frac{\sqrt{a^2 - s^2 \sin^2 \gamma}}{2s \sin^2 \gamma} \times \left\{ \sqrt{\cos^2 \gamma + \frac{2\Delta t}{s} \sin^2 \gamma - \cos \gamma} \right\} \quad (37)$$

となる。ここで、 Δt は、試料上の電子が出る領域の大きさ S_0 と、アパチャーの大きさ A のどちらか大きい方の半分の長さである。また、 ΔE は、半値半幅なので全幅の時は2倍する。従って、分解能 R ((FWHM)/ E_0)は

$$R = \frac{\sqrt{a^2 - s^2 \sin^2 \gamma}}{s \sin^2 \gamma} \times \left\{ \sqrt{\cos^2 \gamma + \frac{A}{s} \sin^2 \gamma - \cos \gamma} \right\} \quad (38)$$

となる。 $\gamma = 0^\circ$ の時は、

$$R = \frac{aA}{2s^2} \quad (39)$$

となり、 $\gamma = 90^\circ$ の時は、

$$R = \sqrt{\frac{(a^2 - s^2)A}{s^3}} \quad (40)$$

となる。(38)式による計算値の逆数を、 $s/a = 0.9$ と $2/3$ の場合についてFig. 6に破線で示す。図の実線は計算機によるシミュレーションの結果である。グラフは $\gamma = 90^\circ$ に対してほとんど対称であるので 90° 以下の範囲について示してある。近似式であるので厳密には合わないが、傾向を良く説明している。前に述べたように、 90° 付近では1次の分散が無いために分解能が悪いが、その他の所ではかなり良いことが判る。

γ の小さいところで分解能が急に立ち上がって良くなのはエネルギーの高い方の粒子が外球に衝突することにより戻って来られないことによるものである。衝突するときの条件は(20)式から、

$$2 - \eta \leq \cos \beta = \sqrt{1 - s^2 \sin^2 \alpha / a^2} \quad (41)$$

となる。Fig. 6の立ち上がりの角を計算すると $s/a = 0.9$ のとき 5.2° 、 $s/a = 2/3$ のとき 12° となり、図の立ち上がりとはほぼ一致する。

また、(41)式を解析すると、 β が 8.1° より小さいときには1%以上エネルギーの高い粒子は全て外球に衝突することが判る。即ち高エネルギー側で1%の分解能がある。 s/a が0.141より小さいときには、全ての α において、

Fig. 6 Emission angle dependence of an inverse of the resolution $E/\Delta E$, for $s/a = 0.9$ and $2/3$. The solid lines are the results of computer simulation. The broken lines are the calculated values with the eq. (38).

β が 0.1° より小さいので、どの角度でも1%の分解能のローパスフィルターとして働くことが判る。

ところで、Sar-Elは $\alpha = 90^\circ$ 付近で近似式を計算したために分解能の式は(40)式と等価な式になっており、これでは2次の分散しか無いので分解能が悪く、分光器としては機能しないと考えた(Fig. 3の一点鎖線)。しかしながら、これは 90° 付近でしか近似式を計算しなかったことによる誤りであり、実際にはFig. 6のように他の角度では分解能が高く、全体としてはFig. 3のように分光器として働くだけの分解能がある。つまり、立体角を広く取った方が分解能が上がるので広く取るべきである。但しこの場合には中心付近で分解能が悪いという欠点が残る。実際の像を見ると、中心付近の一番見たい所に、帯状にS/Nの悪いところが出来てしまい都合が悪い。しかしながら、これは前に述べたように、中心付近だけに効くような障害リングを入れ、また阻止電位グリッドを入れることで改良することが出来る³⁾。

5. TOF への応用の可能性

イオンの角度分布を見ることは吸着サイトの決定や、脱離の機構の解明に重要である。この分光器はパスが長いのでTOFで質量が分けられるかどうか調べてみる。この分光器ではパスの長さは α によって異なり、 α が 90° のとき最も短い。Fig. 5に於て、 $\eta = 1$ の粒子がSから出てTに戻ってくるまでの時間 T は、

Fig. 7 Emission angle dependence of flight-time.
The flight-time of the particles emitted to each angle are normalized to that at 90°.

$$T = \frac{1}{V_0} (\pi a + 4 \sqrt{a^2 - s^2} \sin^2 \alpha) \quad (42)$$

となり、 α が 0° のとき最も長く、 α が 90° のとき最も短い。普通のレンズにおいては光が集まるときには時間も等しくなるが、この分光器は、パスの長さが短いものほど速度が速く、パスが長いほど遅くなるので、厳密に集束するにも拘らず飛行時間が一定にならない。 α は 90° 付近で使うことが多いので、 α が 90° のときの時間 T

(90°) との比をプロットしたものが **Fig. 7** である。 s/a が $2/3$ 以下ならば、ある程度分離できることが判るが時間だけでは質量分解能はあまり高くない。しかしながら、通常の2次元測定においては、パルスの到達時間とともにその x, y 座標も分かるので、それらを併せて計算すれば質量は簡単に判り、分解能も悪くならないので問題は無い。従って、この分光器はパスが長い分だけ TOF には有利に使えらると思われる。

6. おわりに

本報告では、広い立体角に於て歪まない像を得られる2次元表示型の球面鏡分析器を新たに開発し、その基本的な性質について解析的な式を導きながら詳しく述べた。通常の分光器と異なり、楕円軌道であるために解析的な式が得られることもこの分光器の特徴になっている。ここで導いた種々の式はこの分光器を実際に使用するときに設計上大いに役立つものと期待している。

〔文 献〕

- 1) D. E. Eastman et al.: Nucl. Instr. Meth. 172 (1980) 327.
- 2) H. Daimon: Rev. Sci. Instrum. 59 (1988) 545.
- 3) 大門 寛: 日本物理学会講演会 (1988. 4. 1, 於日大郡山) laF 4-8.
- 4) H. Z. Sar-El: Nucl. Instr. Meth. 42 (1966) 71.