

一般セッション(口頭講演) | CS コードシェアセッション:【CS.10】 6.5 表面物理・真空、7.5 原子・分子線およびビーム関連新技術のコードシェア

🎵 2023年9月22日(金) 10:30 ~ 11:15 | 🏠 A501 (熊本城ホール)

[22a-A501-1~3] CS.10 6.5 表面物理・真空、7.5 原子・分子線およびビーム関連新技術のコードシェアセッション

田川 雅人(神戸大)

10:30 ~ 10:45

[22a-A501-1] 超音速分子線を用いたCu₃Pd(111)表面上でのエチレン分子反応

○安藤 雅晃¹、村瀬 菜摘¹、津田 泰孝²、山田 剛司¹、吉越 章隆²、岡田 美智雄³ (1.大阪大院理、2.原子力機構、3.大阪大放射線機構)

10:45 ~ 11:00

[22a-A501-2] ハフニウムが吸着したSi(111)基板の局所/全域で進行する酸化反応機構

○垣内 拓大¹、津田 泰孝²、吉越 章隆² (1.愛媛大院・理工、2.日本原子力研究開発機構)

11:00 ~ 11:15

[22a-A501-3] 2次元材料被覆によるLaB₆仕事関数変化のPEEM観察

○小川 修一¹、遊佐 龍之介²、Gaoxue Wang³、Michael T. Pettes³、Fangze Liu⁴、津田 泰孝⁵、吉越 章隆⁵、虻川 匡司²、Nathan A. Moody³、Hisato Yamaguchi³ (1.日大生産工、2.東北大、3.Los Alamos Nat. Lab.、4.北京理工大、5.原子力機構)

超音速分子線を用いた $\text{Cu}_3\text{Pd}(111)$ 表面上でのエチレン分子反応

Reaction of ethylene on $\text{Cu}_3\text{Pd}(111)$ surface sing supersonic ethylene molecular beam

大阪大院理¹, 原子力機構², 大阪大放射線機構³

○安藤 雅晃¹, 村瀬 菜摘¹, 津田 泰孝³, 山田 剛司¹, 吉越 章隆², 岡田 美智雄³

Osaka Univ.¹, JAEA², Osaka Univ. IRS³

◦Masaaki Ando¹, Natsumi Murase¹, Yasutaka Tsuda²,

Takashi Yamada¹, Akitaka Yoshigoe², Michio Okada³

E-mail: andom22@chem.sci.osaka-u.ac.jp

金属材料の酸化に伴う腐食によって、本来持っている性質が失われることがある。そこで、金属表面上にグラフェンを生成して酸化を抑制する研究が行われてきた[1][2]。グラフェン成長には、通常炭化水素の暴露条件下で反応系全体を加熱しながら生成する方法がとられている。しかしこの方法では分子の並進エネルギーと表面温度のいずれの効果が反応に影響している明らかにされていない。そこで本研究では、低温でグラフェン生成ができる可能性のある銅とパラジウムを組み合わせた $\text{Cu}_3\text{Pd}(111)$ 表面上でのグラフェン生成過程を明らかにする。本研究では、合金の基板を常温として分子のみを活性化できる超音速分子線を用いて、表面状態を放射光 X 線光電子分光法(SR-XPS)で追跡し、並進エネルギーと表面温度の効果を分けて議論することを目指した。

実験は SPring-8 BL23SU に設置された日本原子力研究開発機構の表面化学ステーションを用いて行った。 $\text{Cu}_3\text{Pd}(111)$ 試料表面は、 Ar^+ スパッタリングと加熱のサイクルを繰り返すことにより、清浄化した。その後、表面に超音速エチレン分子線を照射し、表面状態を放射光 X 線光電子分光法(SR-XPS)で追跡した。(図 1)に並進エネルギー0.42 eV のエチレン分子線を一定流束で照射した場合の C1s スペクトルを示す。青色で示した結合エネルギー288 eV 付近にピークがみられ、照射量が増えるにつれて成長することがわかった。発表ではエチレン分子の吸着状態や反応性について詳細を議論する予定である。

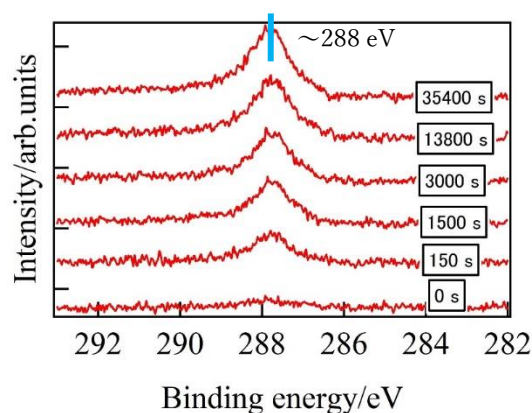


図 1. C1s スペクトルの照射量依存性

[1] Shanshan Chen, *et al.*, ACS Nano 2011, 5 (2) 1321.

[2] Shuichi Ogawa, *et al.*, J. Phys. Chem. Lett. 2020, 11, 9159.

ハフニウムが吸着した Si (111) 基板の局所/全域で進行する酸化反応機構 ～Hf の蒸着量に依存した表面界面酸化状態の違い～

Oxidation mechanism proceeding at local/entire area of hafnium absorbed Si(111)

愛媛大・院理工¹, 日本原子力研究開発機構² °垣内拓大¹, 津田泰孝², 吉越章隆²

Grad. Sch. Sci. Eng., Ehime Univ.¹, Japan Atomic Energy Agency²

°Takuhiko Kakiuchi¹, Yasutaka Tsuda², Akitaka Yoshigoe²

E-mail: kakiuchi.takuhiko.mc@ehime-u.ac.jp

二酸化ハフニウム (HfO_2) は、シリコン (Si) 半導体デバイスの高誘電率ゲート絶縁膜材料として高い注目を集めている。 HfO_2/Si の構造制御には、ハフニウム (Hf) と Si が作る種々の化合物の理解から出発して、酸素分子 (O_2) の並進運動エネルギー (E_t) や表面温度等に依存した生成物の違いから反応素過程を解明することが必要不可欠である。本研究では、異なる量の Hf が吸着した Si(111) [Hf-Si(111)]上に特定の E_t を持った O_2 を照射しながら放射光光電子分光法を行うことで表面界面の化学状態変化を観測し、Hf-Si(111)の酸化反応機構を考察した。

実験は、大型放射光施設 SPring-8 の BL23SU 表面反応分析ステーションにて行った。超高真空中 (5×10^{-8} Pa) で清浄な Si(111)-7×7 表面を作製した後、約 0.5、2.0 原子層 (ML) の Hf を堆積させた。試料は、超高純度の O_2 分子曝露 ($E_t \approx 0.03$ eV)、および超音速分子線発生装置を用いて $E_t \approx 0.39$, 2.2 eV まで加速した O_2 ビーム照射によって酸化した。試料の化学状態変化は、Hf 4f, Si 2p, O 1s 内殻光電子スペクトル (CLS) 測定より追跡した。

図は、(a) 0.5 および(b) 2.0 ML Hf-Si(111)の酸化が飽和した後に得られた Hf 4f_{5/2, 7/2}CLS と Voigt 関数でフィットした結果である。酸化に由来するピークは、(a) 0.5 ML の方が (b) 2.0 ML のそれより低束縛エネルギー (BE) 側に現れた。これは主に Hf^{3+} 状態のシリケートまでしか進行しないためである。この理由は、(a) 0.5 ML の低被服率では Hf が Si(111)-7×7 の rest-atom や adatom 上に吸着して特異な局所構造 (hexagonal structure) を形成し、その周辺でのみ酸化が進行したことによる。一方、2.0 ML では、 Hf^{4+} 状態のシリケートまで生成しており、酸化反応が表面の金属 Hf 層全域で速やかに進行したためと考えられる。

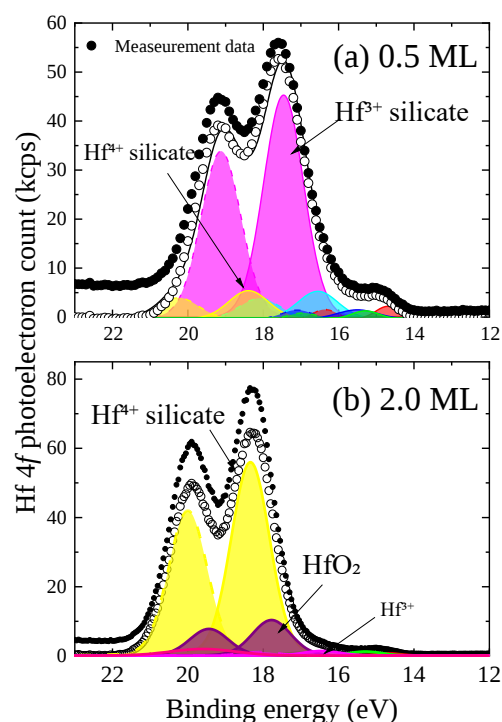


Fig. Hf 4f_{5/2, 7/2} photoelectron spectra obtained from Hf-Si(111) with the Hf thicknesses of (a) 0.5 and 2.0 MLs. These spectra were fitted by using Voigt function after subtracting the background.

2次元材料被覆による LaB₆ 仕事関数変化の PEEM 観察

PEEM Observation of Work Function Changes on LaB₆ Coated by 2D Materials

日大生産工¹, 東北大², ロスアラモス国立研³, 北京理工大⁴, 原子力機構⁵

○小川 修一¹, 遊佐 龍之介², G. Wang³, M. T. Pettes³, F. Liu⁴, 津田 泰孝⁵, 吉越 章隆⁵,
虻川 匡司², N. A. Moody³, H. Yamaguchi³

Nihon Univ.¹, Tohoku Univ.², LANL³, Beijing Inst. Technol.⁴, JAEA⁵, °S. Ogawa¹, R. Yusa², G. Wang³,
M. T. Pettes³, F. Liu⁴, Y. Tsuda⁵, A. Yoshigoe⁵, T. Abukawa², N. A. Moody³, H. Yamaguchi³

E-mail: ogawa.shuuichi@nihon-u.ac.jp

六ホウ化ランタン (LaB₆) は低い仕事関数をもち熱電子カソードとして利用されているが、仕事関数の更なる低下と高い耐久性の達成によりフォトカソードとしての利用も期待される。本研究では LaB₆ の耐久性と電子放出量向上を目的として、2次元材料 (グラフェンおよび六方晶窒化ホウ素 (hBN)) 被膜による仕事関数変化を光電子顕微鏡 (PEEM) で調べた[1]。

LaB₆(100)表面に単層グラフェンと hBN を湿式転写法で転写被膜した。転写前の LaB₆ 表面は平均粗さ 1 nm 以下で平坦であることを AFM により確認した。また転写後の二次元材料は高品質の結晶を保っていることをラマン分光法で確かめた。PEEM 観察ではエネルギー 4.9 eV の水銀ランプを用いて仕事関数の空間分布を調べた。仕事関数の基準となるフェルミ準位は Au 薄膜を用いて決定し、SR-XPS で化学状態を調べた。さらに DFT 計算を行い、2次元材料被膜が LaB₆(100)の仕事関数に与える影響を理論的に検討した。

図 1(a)は 2次元材料で被覆された LaB₆(100)表面の模式図で、赤と緑の破線がそれぞれグラフェンと hBN を示す。図 1(b)は 905°C加熱後の PEEM 像であり、hBN コーティングされた領域で最も強い光電子放出が観測された。hBN 領域はグラフェン領域よりも明るく、hBN が仕事関数の低下に重要な役割を果たしていることが示された。

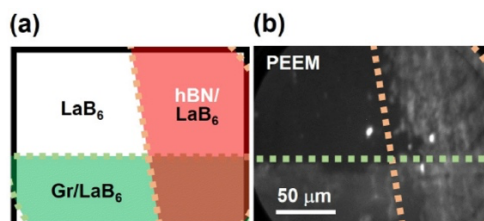


図 1 (a) 作製した 2次元材料被覆 LaB₆ の模式図。白、緑、赤の領域はそれぞれ、LaB₆、グラフェン被覆 LaB₆、hBN 被覆 LaB₆ を示す。(b) 905°C加熱後に、室温で撮影した PEEM 画像。

次に LaB₆(100)表面における二次元材料被覆による仕事関数変化について DFT 計算を実施した。計算結果から、hBN コーティングでは仕事関数が低下し、グラフェンコーティングでは増加することが示された。これは、界面の双極子効果によるものと考えられる。すなわち、半金属のグラフェンでは、LaB₆ から 2次元材料伝導帯への電荷移動により内向きの双極子が誘起され、仕事関数が増大する。一方 hBN ではバンドギャップが大きい[2]、交換反発に由来する外向き双極子が界面に形成され、仕事関数が減少することがわかった。

参考文献

- [1] H. Yamaguchi, R. Yusa, G. Wang, M. T. Pettes, F. Liu, Y. Tsuda, A. Yoshigoe, T. Abukawa, N. A. Moody, S. Ogawa, Appl. Phys. Lett. **122**, 141901 (2023).
- [2] S. Ogawa, T. Yamada, R. Kadowaki, T. Taniguchi, T. Abukawa, Y. Takakuwa, J. Appl. Phys., **125**, 144303 (2019).