

全反射高速陽電子回折を用いた最表面構造決定 Topmost surface structure determination using total reflection high-energy positron diffraction

深谷有喜¹、前川雅樹¹、河裾厚男¹、望月出海²、和田健²、兵頭俊夫²

¹ 原子力機構先端基礎研、² KEK-PF

fukaya.yuki99@jaea.go.jp

課題有効期間： 2014年10月～2017年9月

実験ステーション： 低速陽電子

ビームタイム： 2014年11月13日～11月20日、12月7日～12月14日

1. 要旨

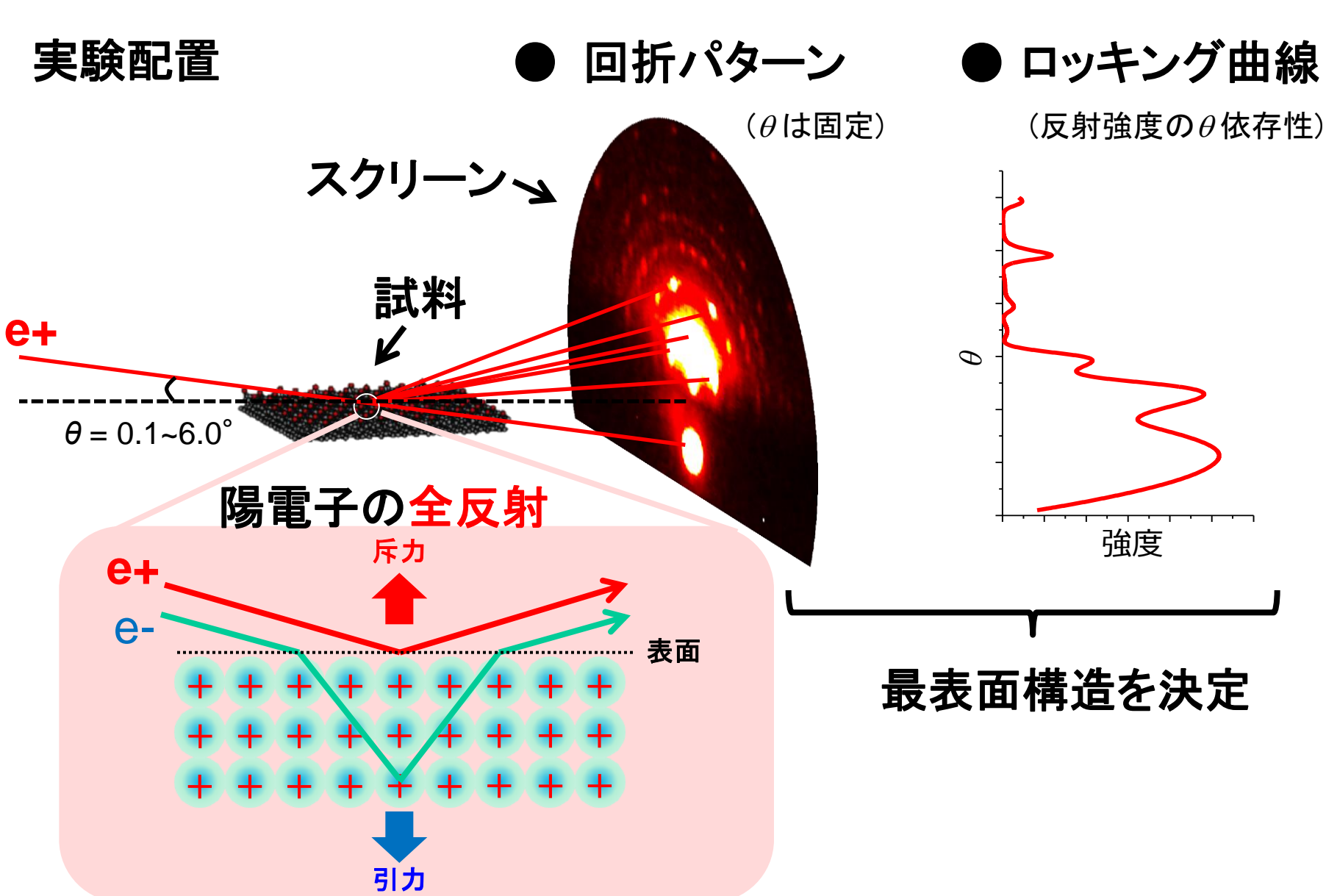
本研究では、全反射高速陽電子回折(TRHEPD)を用いた最表面の原子配置の高精度決定および、最表面構造解析法としてのTRHEPDの高度化を目指している。陽電子は、電子の反粒子であり、電子とは逆のプラスの電荷を持つ。このため、陽電子が結晶表面に入射する際、結晶ポテンシャルは障壁として働き、ある臨界角以下で全反射が起こる。全反射条件下では、陽電子の結晶表面への進入深さは2 Å以下であるため、そこから得られる回折パターンはほぼ最表面のみの情報を含む。さらに、全反射の臨界角をわずかに超えた視射角に設定すると、バルクの情報を含むことなく、最表面直下の情報も感度良く得ることができる。これらのことにより、TRHEPD法は最表面およびその直下の原子配列の決定に極めて有用な手法である。

最近我々は、KEK低速陽電子実験施設(SPF)にて加速器ベースのTRHEPD装置を開発し、全反射条件下における鮮明な回折パターンを得ることに成功した[1]。本研究では、TRHEPDを用いて、(1)最表面の原子配置がその物性に重要な役割を果たす表面の原子配置を決定すること、(2)構造モデルに基づく計算との比較なしに実験データから最表面の原子配置を決定する直接決定法の開発を試みる。

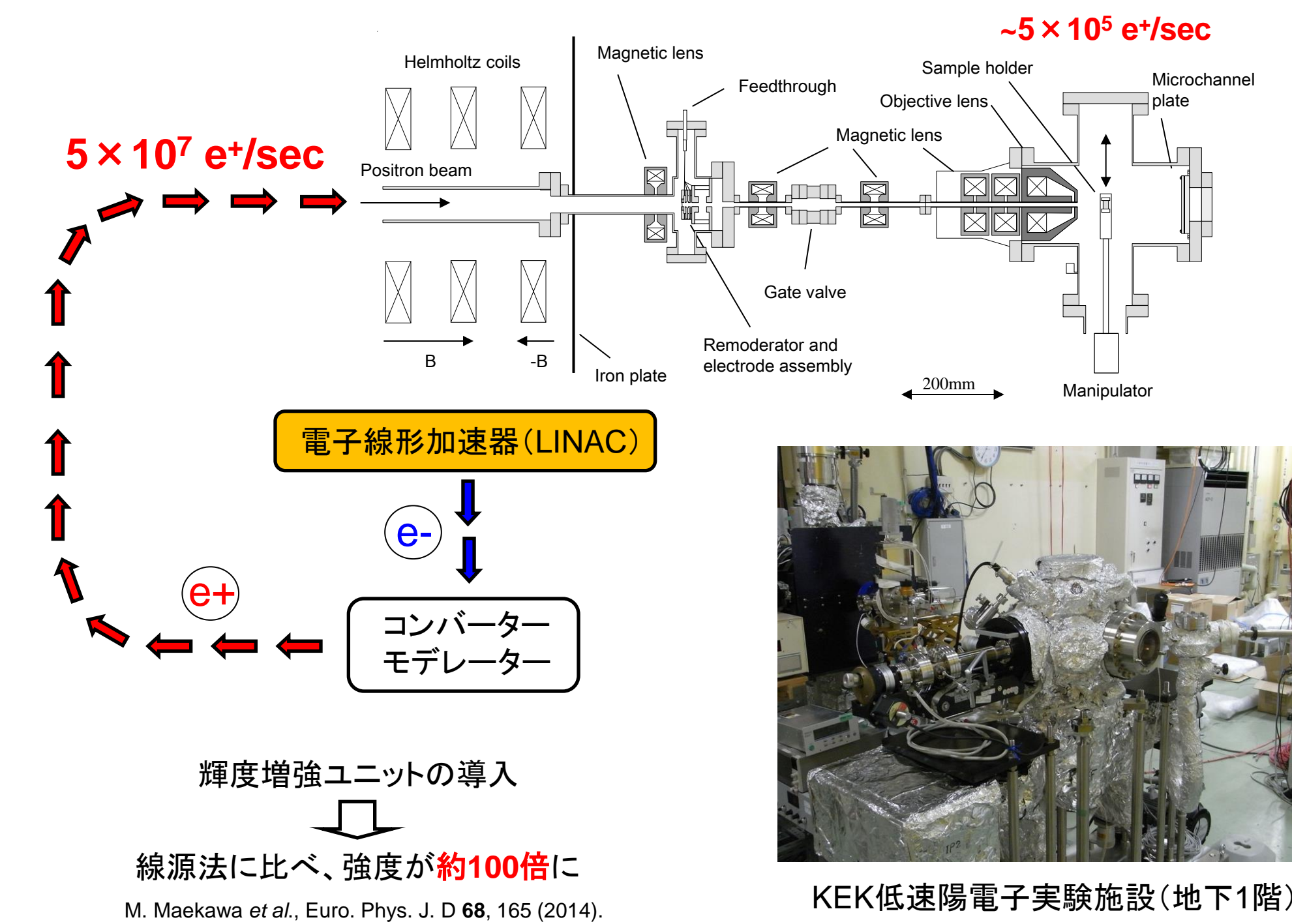
本年度は、金属表面上のグラフェンの構造決定とTRHEPDパターンを用いた最表面直接決定法の開発を推進した。前者においては、Cu(111)およびCo(0001)表面上のグラフェンの吸着高さを決定し、貴金属と遷移金属基板上でグラフェンの高さに明確な違いを見出した。後者においては、全反射条件下におけるTRHEPDパターンを取得し、最表面原子配列の直接決定法の開発に向けた予備的な解析を行った。

[1] Y. Fukaya et al., Appl. Phys. Express 7, 056601 (2014).

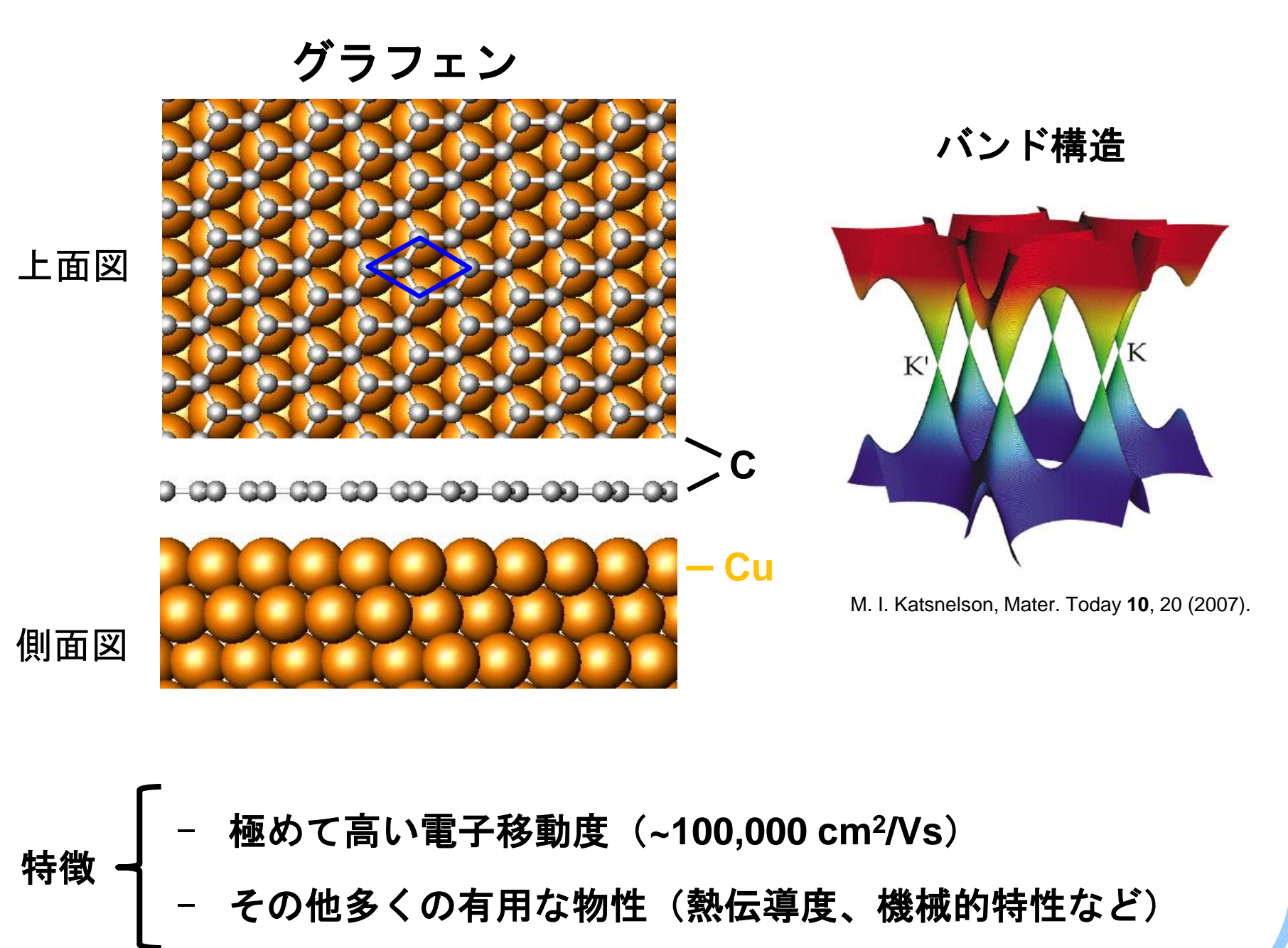
2. 全反射高速陽電子回折 (TRHEPD) Total Reflection High-Energy Positron Diffraction



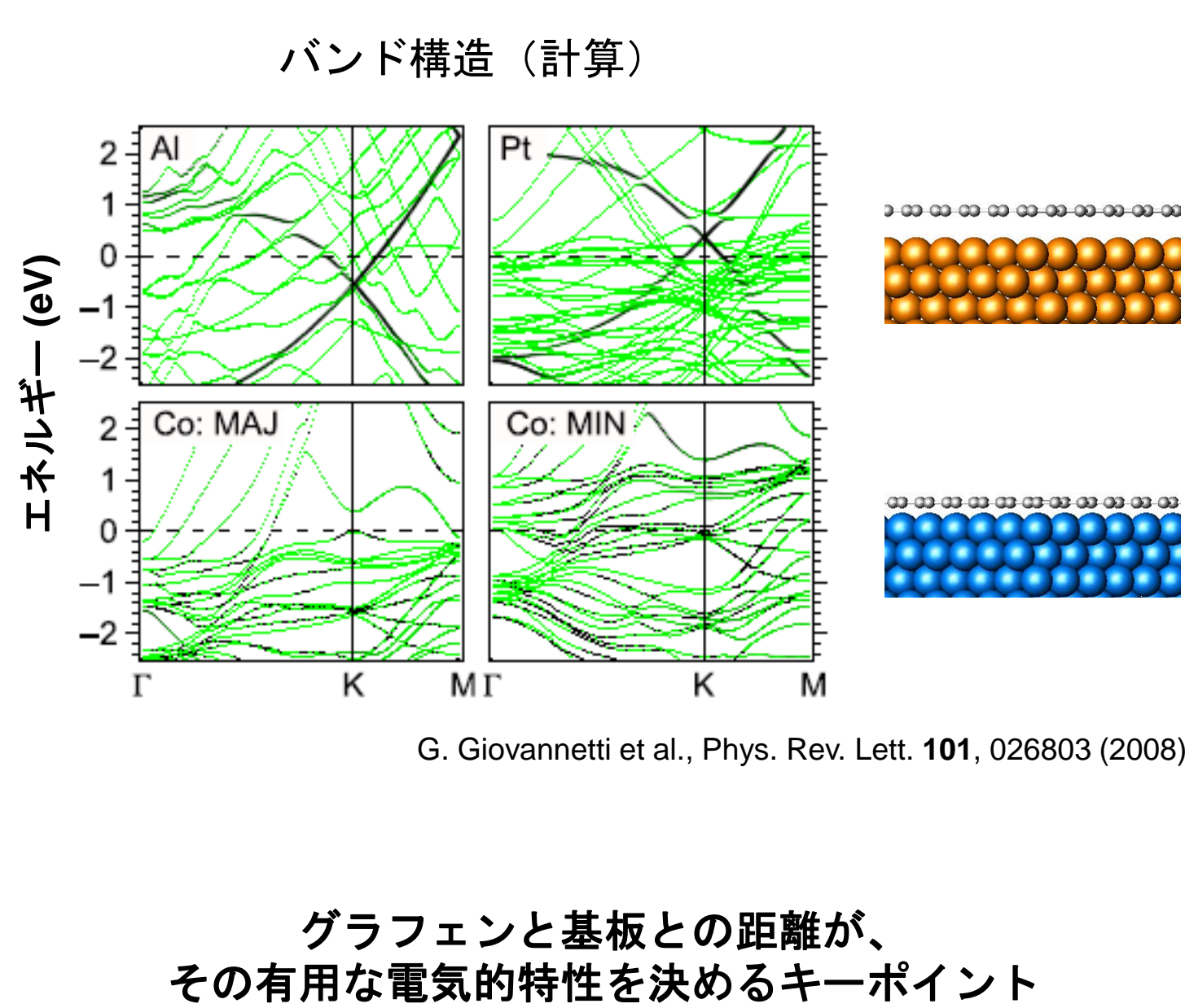
3. TRHEPD装置 (加速器ベース) (2010年～)



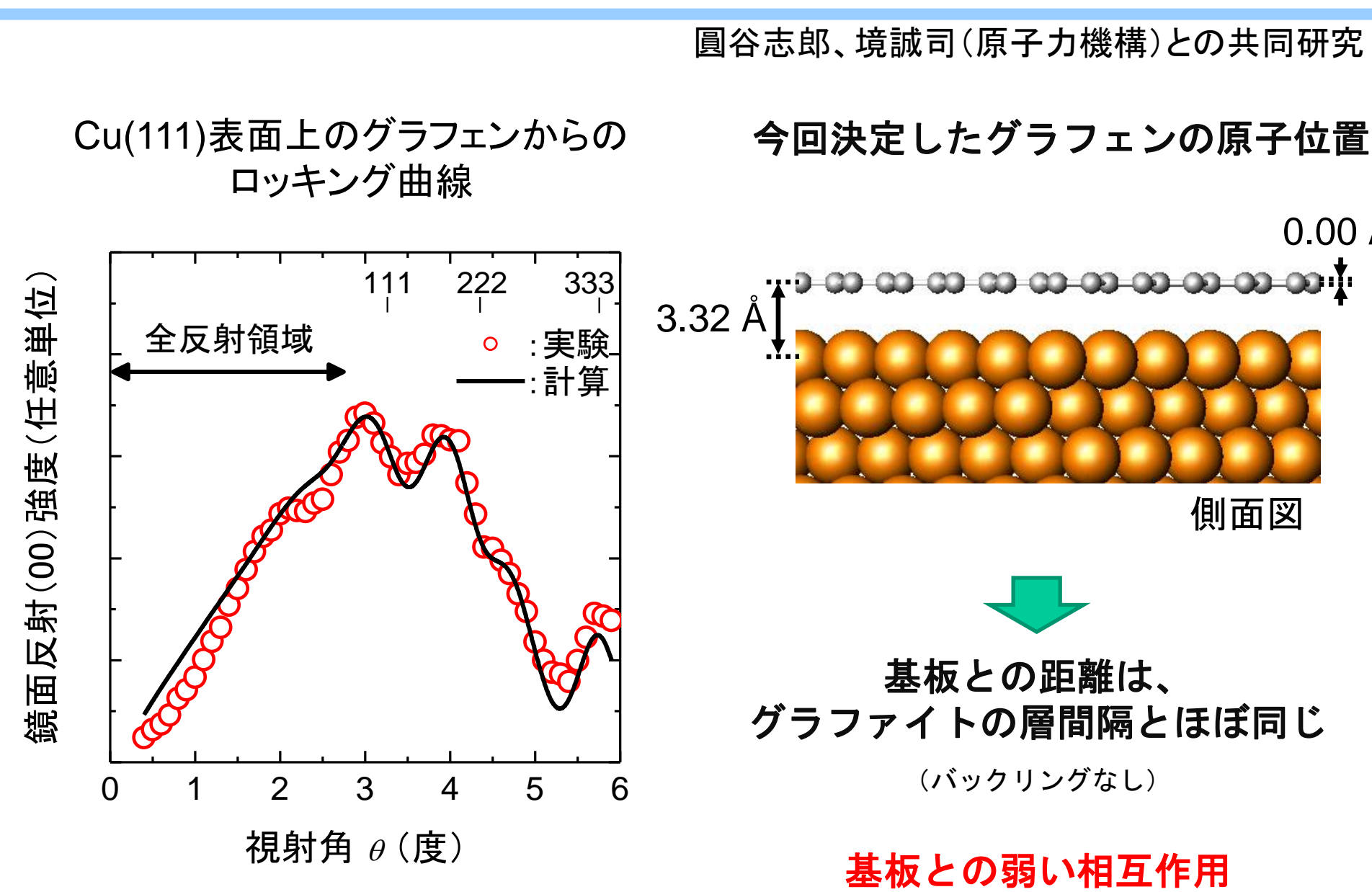
4. グラフェン: 二次元カーボンシート



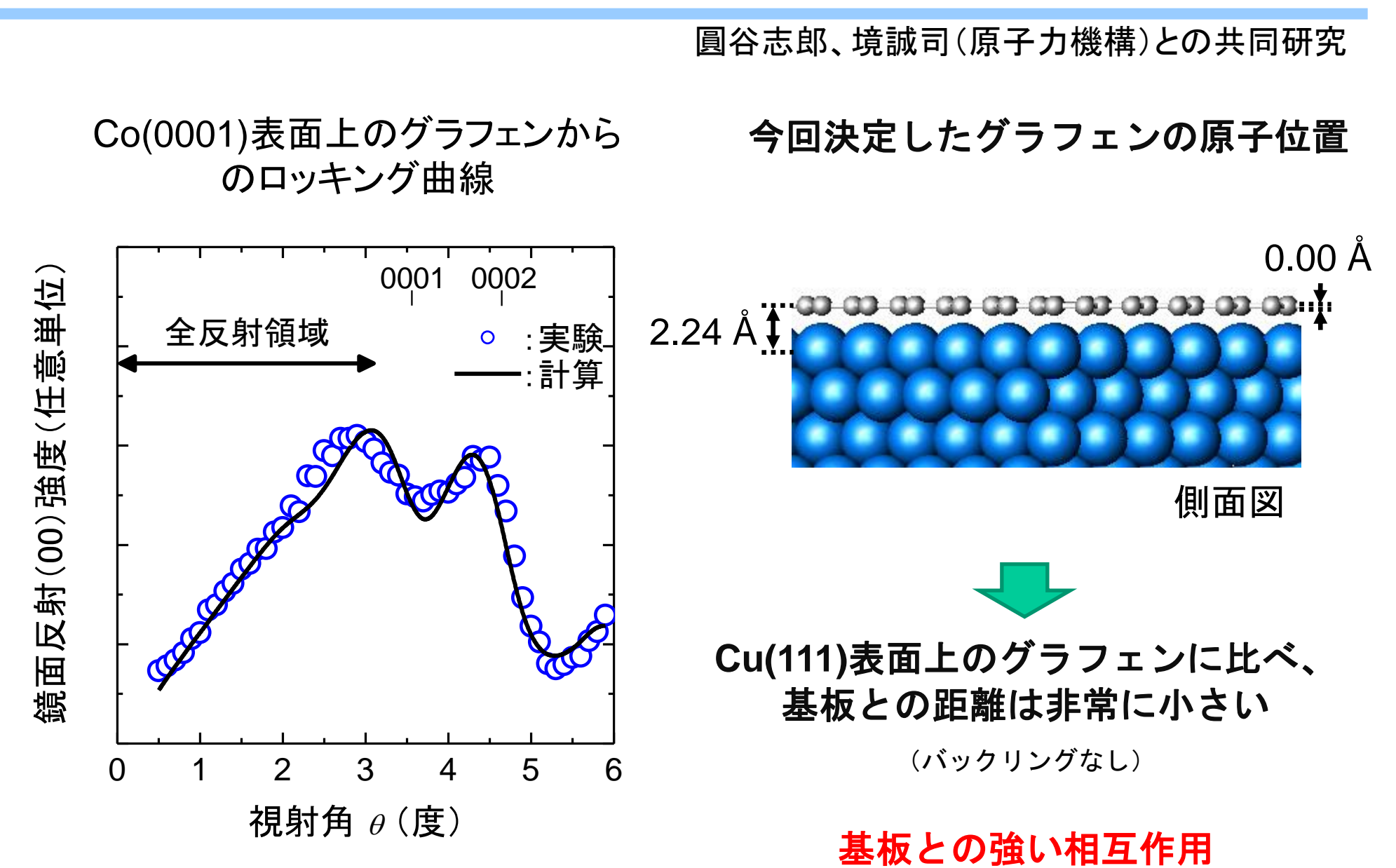
5. 基板との相互作用



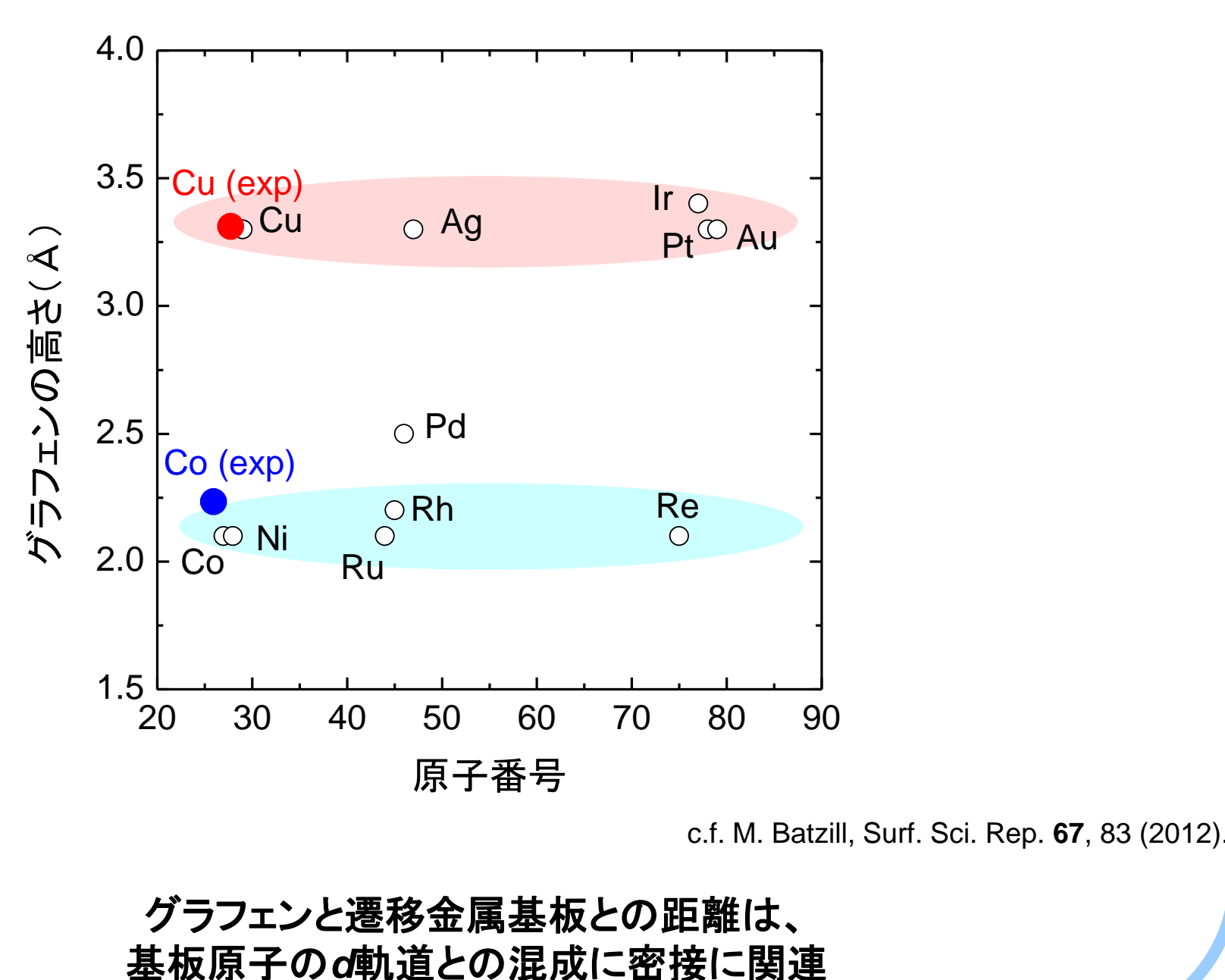
6. Cu(111)表面上のグラフェン



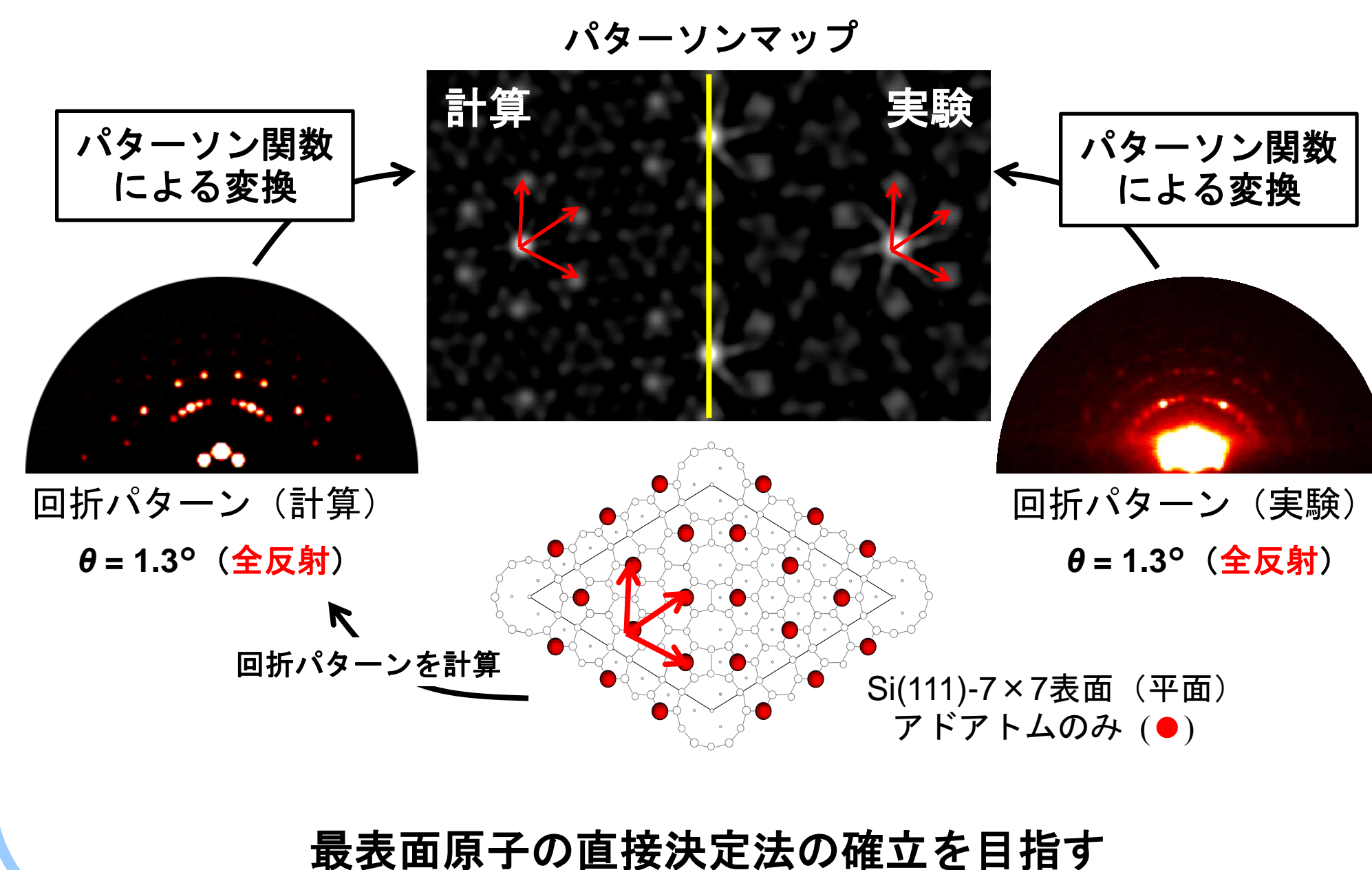
7. Co(0001)表面上のグラフェン



8. グラフェンと金属基板との距離



9. 最表面原子配置の直接決定



10. 今後の展開

次年度は、さまざまな金属表面上でのグラフェンの構造決定を行い、基板の違いによるグラフェンの高さの違いを系統的に調べる。また、TRHEPD法を用いた最表面原子配列の直接決定法の開発を進める。

- 研究成果(代表的な学会発表)
- Y. Fukaya
"Total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD) for determination of topmost surface structure"
11th Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics (AISAMP11) (Sendai, 8 October, 2014) (Invited)
 - T. Hyodo, Y. Fukaya, I. Mochizuki, K. Wada, M. Maekawa, T. Shidara, A. Ichimiya, and A. Kawasuso
"Recent results with total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD)"
The 7th International Symposium on Surface Science (ISSS-7) (Matsue, 6 November, 2014) (Invited)
 - T. Hyodo, Y. Fukaya, I. Mochizuki, M. Maekawa, K. Wada, T. Shidara, A. Ichimiya, and A. Kawasuso
"Total-Reflection High-Energy Positron Diffraction (TRHEPD)"
11th International Workshop on Positron and Positronium Chemistry (PPC-11) (Goa, 12 November, 2014) (Invited)
 - 深谷有喜
"全反射高速陽電子回折法を用いた最表面構造の解明"
第33回表面科学研究会「深き方向分析の最前線～表面から固体界面、欠陥分析まで～」(東京, 2014年11月21日) (招待講演)