

光電子分光による金属 - 極性酸化物界面相互作用の研究

小澤健一⁽¹⁾, 大場由香子⁽²⁾, 枝元一之⁽²⁾

⁽¹⁾東京工業大学院理工学研究科, ⁽²⁾立教大学理学部

六方晶系ウルツ鉱型構造を持つ ZnO の単結晶表面には, Zn イオンと O イオンでそれぞれ終端された二つの極性面 ZnO(0001)-Zn 終端面と ZnO(000 $\bar{1}$)-O 終端面 がある。終端原子組成の異なる酸化物表面と金属の相互作用の詳細を明らかにすることは, 金属 - 酸化物界面の理解を深める上で重要であり, 精力的に研究が行われている。走査トンネル顕微鏡を用いた研究では, Cu - ZnO 界面相互作用は Zn 終端面より O 終端面の方が強いことを示唆する結果が得られている[1]。我々は, 極性面に依存した相互作用の違いを電子状態の立場から明らかにするために光電子分光を用いた研究を行っている。

実験は BL-1C にて ARPES II を用いて行った。ZnO 極性表面試料は, 真空中でのアニーリングとアルゴンイオンスパッタリングで清浄化した。Cu は電子衝撃法を用いた Cu ロッドの加熱・昇華により ZnO 表面に吸着させた。

Fig. 1 は Cu 被覆率に依存した Zn 終端面の PES スペクトルである。Cu 3d および 4sp 準位由来の構造がフェルミ準位から 4 eV に成長してくるのが分かる。O 終端面でもほぼ同様のスペクトル変化が得られる。Fig. 2 は Cu 吸着に伴う ZnO バンドベンディング変化(ΔV_{BB})とイオン化ポテンシャル変化(ΔI)を示したものである。 ΔI は二つの表面ともに約 0.2 - 0.3 eV 減少し, これは Cu から ZnO への電荷移動があることを示す。 ΔV_{BB} も両表面でマイナス値を示す(これは清浄面に比べ下方へベンディングする事を示す)が, 吸着初期の変化の大きさは Zn 終端面より O 終端面で大きい。これは電荷移動量が O 終端面の方で大きいためであり, Cu が Zn 終端面に比べると O 終端面と強く結合することの反映である。

[1] L.V. Koplits, O. Dulub, U. Diebold, *J. Phys. Chem. B* **107** (2003) 10583.

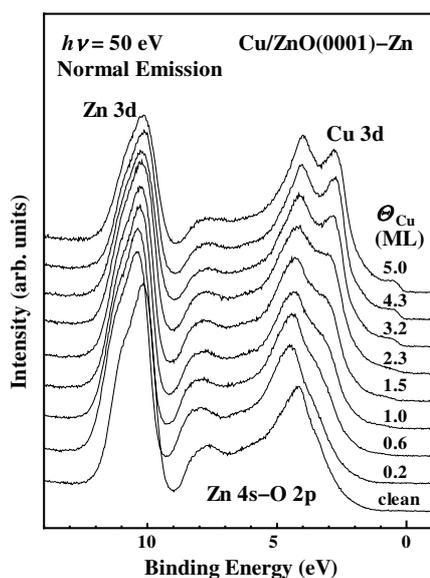


Fig. 1 Change in the normal emission spectrum of ZnO(0001)-Zn as a function of Cu coverage.

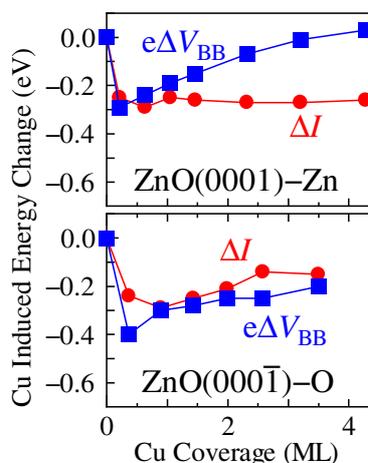


Fig. 2 Cu-induced changes of the ionization potential (ΔI) and bending of ZnO band ($e\Delta V_{BB}$) for two adsorption systems. Negative values of $e\Delta V_{BB}$ means that the ZnO band bends downwards with respect to the clean surface.