

遷移金属炭化物・窒化物の仕事関数のユニバーサルな推定

Universal Estimation of Work Function of Transition Metal Carbides and Nitrides

物材機構 ○吉武 道子

NIMS, °Michiko Yoshitake

E-mail: yoshitake.michiko@nims.go.jp

遷移金属炭化物・窒化物は、比較的酸化されにくく、安定な低仕事関数表面が形成できると期待されて電子放出源材料として有望視されているほか、半導体デバイスの電極材料としても研究されている材料である。電子放出源においても電極材料においても、仕事関数の値は特性を決定付ける重要なパラメータである。しかし、遷移金属炭化物・窒化物は不定比化合物であり、組成がきちんと決定された単結晶試料の作製が容易ではないことから、ハンドブックに記載できるような再現性の高い信頼できる仕事関数の測定値が得られている系は非常に限られている。そこで、仕事関数が決定付けられる仕組みの観点を取り入れて、多くの系について値が報告されている第一原理計算の結果と、限られた系の測定値を用いて、遷移金属の種類による仕事関数変化のトレンドや同一の遷移金属において炭化物と窒化物との違い、表面欠陥の影響について一般的に推測する方法を提案する。

仕事関数は一般的にバルク由来の項と表面由来の項に分けられ、バルク由来の項はフェルミ準位の位置、表面由来の項は表面の電子の真空側へのしみだし具合で決まる。ジェリウムモデルによると、仕事関数はウィグナーザイツ半径の関数として表されるが、遷移金属炭化物・窒化物のウィグナーザイツ半径は対応する金属とほとんど同じである。そのため、化学量論比の遷移金属炭化物・窒化物の仕事関数の値は、対応する金属の仕事関数の値に近く、金属と同様な元素依存性を示す。また、右図は炭化物・窒化物のフェルミ準位近傍の電子の状態密度の第一原理計算結果を電子の由来する元素ごとに模式的に示したもので、破線はそれぞれの炭化物・窒化物におけるフェルミ準位の位置を表す。この図から、実用的な炭化物・窒化物（d 電子が少ない金属）ではフェルミ準位はほとんど金属由来であることがわかる。そのため、炭素や窒素欠陥が入った場合の仕事関数の値は、バルク項のみ影響を受け、表面項はほとんど欠陥の影響を受けない。炭素・窒素欠陥がバルク項に与える影響は、欠陥と炭化物・窒化物の強度の相関から推定することができる。

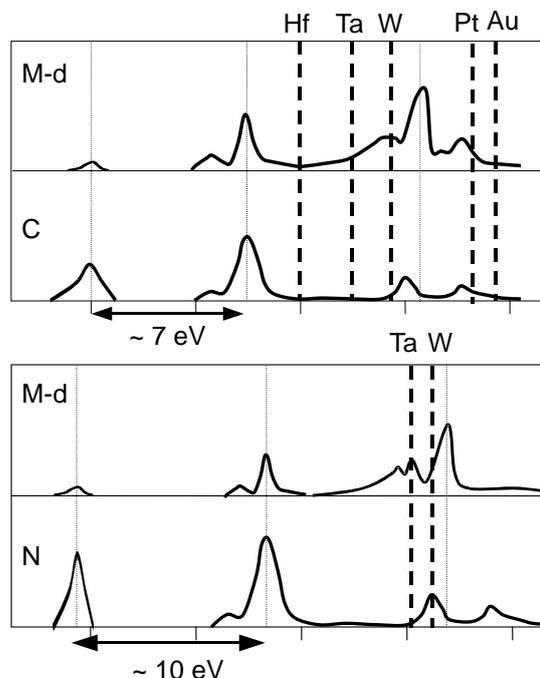


図 5d 遷移金属炭化物・窒化物のフェルミ準位近傍の電子の状態密度を金属由来と炭素・窒素由来に分けて表示した模式図