ダイヤモンド(100)表面における水素および酸素の反応経路解析

Reaction path analyses of hydrogen and oxygen molecules onto diamond (100) surfaces

金沢大院自然 [1], ○(M1)堀江 隆之 [1], 松本 翼 [1], 徳田 規夫 [1], 猪熊 孝夫 [1]

Grad. School of Natural Sci. & Tech. Kanazawa Univ. [1] ○Takayuki Horie[1],

Tsubasa Matsumoto[1], Norio Tokuda[1], Takao Inokuma[1]

E-mail: takayukihorie598@gmail.com

【はじめに】ダイヤモンドの表面特性は終端構造により変化することが知られている。一般に、水素終端表面は疎水性、負の電子親和力、p 型表面伝導層の形成という特徴を有し、酸素終端表面は親水性、正の電子親和力、表面伝導層の除去という特徴を有している。この 2 種の終端構造における表面は大気中で安定であり、その性質をデバイス開発に応用することができる。

表面界面の特性は電気伝導性に大きく寄与し、重要である。本研究では表面における吸着反応に焦点をあて、水素終端および酸素終端構造の形成過程を、第一原理計算を用いてポテンシャルエネルギー曲面(PES)を算出することにより解析を行った。

【計算方法】本研究では密度汎関数計算プログラム Octopus を使用した。交換相関汎関数には PBE-GGA を用いた。

Fig. 1 にダイヤモンド(100)表面と酸素分子に対する PES 計算に用いたバルク構造を維持した表面を有する $C_{78}H_{50}$ クラスターを示す。

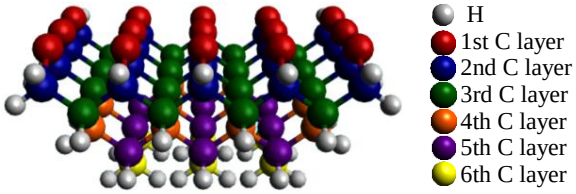

Fig.1. $C_{78}H_{50}$ Cluster

Fig. 2 にダイヤモンド(100)表面と酸素分子に対する PES 計算のパラメータ図を示す。ダイヤモンド表面から酸素分子までの距離 z、酸素原子間の距離 R を変数として計算を行った。

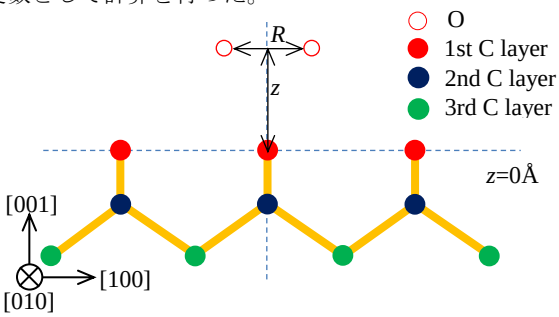

Fig. 2. Parameters of the PES calculation for oxygen molecule on the diamond (100) surface

【計算結果】Fig. 3 にダイヤモンド(100)表面と酸素分子に対する PES 計算結果を示す。この図は極小点 B(R=2.52Å, z=0.73Å)におけるエネルギーの値を基準に相対エネルギーとして酸素分子が感じるポテンシャルエネルギーを表示したものである。Fig. 4 に点 B における原子配置を示す。計算範囲において、点 B で O-bridge 型の終端構造をとるとき最も安定であると言える。点 A から B への反応経路を仮定したとき 1 eV 程度のエネルギー障壁が存在した。この障壁を超えた際に O-bridge 型の終端構造としてダイヤモンド(100)表面に酸素が化学吸着する可能性が示された。

当日は(2×1)再構成表面を有するダイヤモンド(100)表面と水素または酸素に対する PES 計算の結果についても報告する予定である。

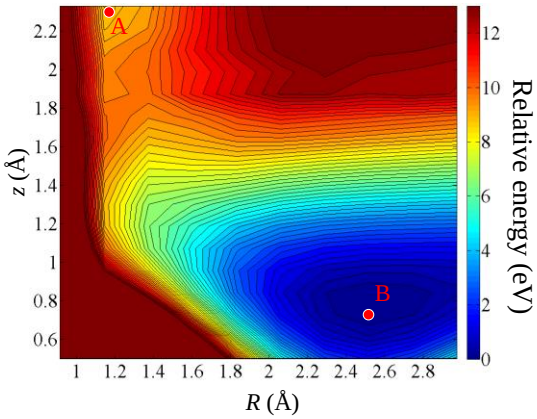

Fig. 3. PES for oxygen molecule on the diamond (100) surface

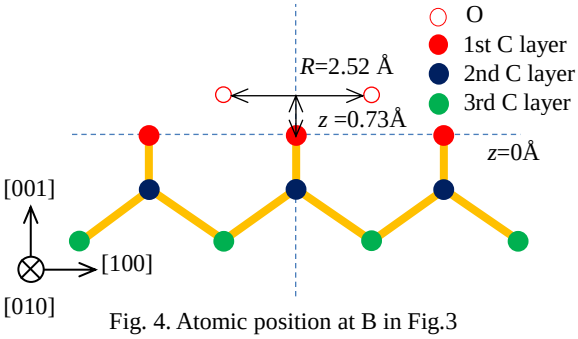

Fig. 4. Atomic position at B in Fig.3

【謝辞】本研究の一部は金沢大学先魁プロジェクトの助成を受けて行われた。

© 2016年 応用物理学会