

# 金属－酸化物薄膜接合系におけるエネルギーバンドアライメント

## Energy Band Alignment in Metal-Oxide Junction

岡山大学院自然<sup>1</sup>, 産総研<sup>2</sup>, (株) 本田技研<sup>3</sup>, 東工大フロンティア材料研<sup>4</sup>, INPT<sup>5</sup>

○狩野 旬<sup>1</sup>, 押目 典宏<sup>2</sup>, 廣瀬 哲<sup>3</sup>, 上田 剛慈<sup>1</sup>, 安井 伸太郎<sup>4</sup>, 浜寄 容丞<sup>4</sup>, 伊藤 満<sup>4</sup>,  
三上 仁志<sup>3</sup>, 池田 直<sup>1</sup>, 藤井 達生<sup>1</sup>, 柏原 浩大<sup>1</sup>, Julien Schneider<sup>5</sup>

Grad. Sch. of Sci. Tech., Okayama Univ.<sup>1</sup>, AIST<sup>2</sup>, Honda R&D<sup>3</sup>, MSL, Tokyo Tech.<sup>4</sup>, INPT<sup>5</sup>

○Jun Kano<sup>1</sup>, Norihiro Oshime<sup>2</sup>, Satoshi Hirose<sup>3</sup>, Takeji Ueda<sup>1</sup>, Shintaro Yasui<sup>4</sup>, Yosuke Hamasaki<sup>4</sup>,  
Mitsuru Itoh<sup>4</sup>, Hitoshi Mikami<sup>3</sup>, Naoshi Ikeda<sup>1</sup>, Tatsuo Fujii<sup>1</sup>, Kodai Kashihara<sup>1</sup>, Julien  
Schneider<sup>5</sup>

E-mail: jun@psun.phys.okayama-u.ac.jp

金属ナノ粒子を酸化物粒子に担持させた構造体は、排ガス浄化触媒、光触媒、改質触媒として広く利用されている。同じ金属種でも担体となる酸化物の種類を変えると触媒活性が変化することが知られており、担体効果と呼ばれる[1]。担体効果は金属については粒子サイズ、担体については酸素貯蔵能や表面の酸塩基性を起源とすることもあるが、化学反応を電子授受によるものと捉え、金属－酸化物接合界面に形成されるショットキー障壁による電子整流性を振り所にと考えても良い。そこで本研究では、異なる酸化物薄膜に接合させた Pd 金属薄膜の仕事関数を計測し、酸化物によって変化する仕事関数の挙動を金属－酸化物間で起こるバンドアライメントから議論する。

図 1 (a) に  $\text{ZrO}_2$  (ZO),  $\text{BaTiO}_3$  (BTO),  $\gamma\text{Al}_2\text{O}_3$  (ALO) のエネルギー準位図を示す。バンド構造は光電子収量法から価電子帯上端  $E_v$ , 光反射率測定よりバンドギャップ  $E_g$  を求め、担持させた Pd の仕事関数  $W_{\text{Pd}}$  はケルビンフォース顕微鏡で測定している。ZO に接合した Pd のみバンド構造から予想される  $W_{\text{Pd}}$  と大きく異なり、これをフェルミ準位のピンングによるものと考えた[2]。この現象を捉えるために、NO 分子の Pd 表面での解離吸着過程を電流－電圧 ( $I$ - $V$ ) 測定で観測した (図 1(b))。NO 分子の吸着により Pd 表面では Pd-NO 分子軌道が形成され、 $W_{\text{Pd}}$  が変化することでバンドの再アライメントが起こる。

Pd/ZO のみ NO 吸着前後での  $I$ - $V$  挙動に変化がなく、ピンングがあることがわかった。

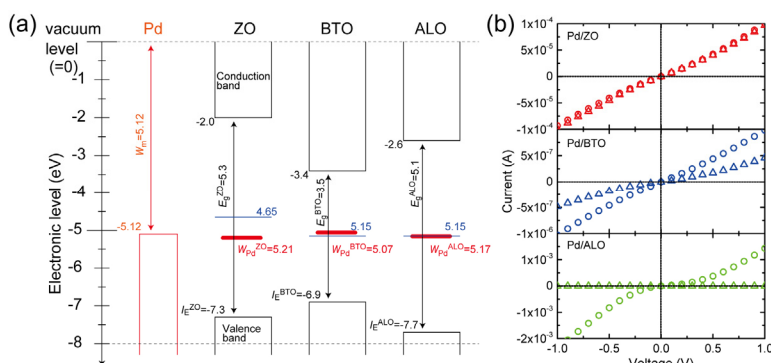


Fig. 1. (a) The band lineup of bulk Pd and oxide semiconductors. (b) In situ  $I$ - $V$  profiles of Pd/ZO, BTO, and ALO measured at room temperature. Open circles and triangles are obtained in He gas and 1% NO + 99% He mixed-gas atmosphere, respectively.

[1] S. J. Tauster, S. C. Fung, and R. L. Garten, J. Am. Chem. Soc. **100**, 170 (1978).

[2] S. M. Sze, K. K. Ng, *Physics of Semiconductor Devices*, 3rd ed., (John Wiley & Sons, New Jersey, 2007).