

全反射高速陽電子回折 (TRHEPD) 方位角プロット法による チタニア表面の構造解析

Azimuthal-plot analysis for the rutile-TiO₂ surface

by using total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD)

高エネ物構研¹, 原子力機構先端基礎² ◯望月出海¹, 深谷有喜², 一宮彪彦¹, 兵頭俊夫¹

KEK-IMSS¹, JAEA-ASRC² ◯Izumi Mochizuki¹, Yuki Fukaya², Ayahiko Ichimiya¹, Toshio Hyodo¹

E-mail: mochizu@post.kek.jp

全ての物質において内部の静電ポテンシャルは正であり、正電荷を持つ陽電子の物質中のポテンシャルエネルギーは正である。このため全反射高速陽電子回折 (TRHEPD, 図 1) 法[1]では、視射角 θ が臨界角 θ_c より小さいと、陽電子は全反射[2]して物質内に侵入できず、最表面のみプローブする。すなわち全反射条件の回折パターンは下層の情報を含まないので、最表面の原子配列だけに注目して構造決定できる。一方、 θ が θ_c 以上だと、陽電子も内部に侵入するが、表面に近づく向きに屈折して浅い領域を進む。そこで θ を (θ_c 近傍など) 適切に選べば、パターンは最表面とその直下層のみの情報を含み、それより下層の情報を含まない[2]。ここでは全反射条件で決定した最表面原子配列を前提に、その直下層のみに集中して構造決定できる。これを繰り返せば、上から順に精緻な構造決定が可能となる。

この TRHEPD の表面超敏感性を直接活かすため、図 1 のように、視射角 θ を所望の角度に固定し、ビーム方位角 φ を、試料を面直軸周りに回して調整しつつ、パターン取得する「方位角プロット法[3]」による構造解析法を開発している。

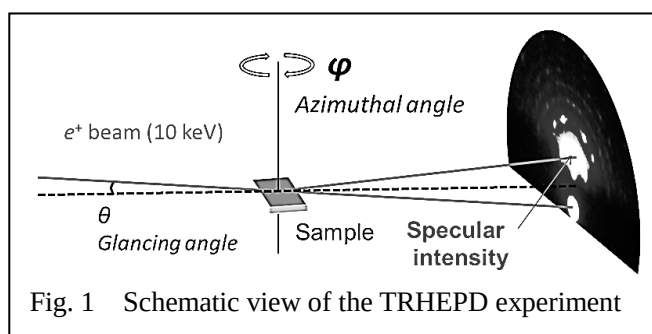


Fig. 1 Schematic view of the TRHEPD experiment

実験は KEK 低速陽電子実験施設にて行い、専用 LINAC で加速した電子の制動放射で発生させた 15 keV の高強度陽電子ビーム[4]を、10 kV に保った W 薄膜に打ち込んで高輝度化[5]し、10 keV の高輝度陽電子ビームを生成し使用した (輝度増強後の陽電子ビームフラックス: $\sim 10^6$ e⁺/sec)。

ここでは方位角プロット法による解析を、まずは構造が既知であるルチル型 TiO₂ (110) (1×1) 表面に適用して本手法の実証と有用性の検証を行った。講演では、実験で得られた複数の視射角 θ や方位角 φ に対する方位角プロットを、動力学的回折理論をもちいた再現計算と比較することで検証しつつ、本手法の特徴について述べる。

[1] Y. Fukaya, et al., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **52** (2019) 013002; 兵頭俊夫, 固体物理 **53** (2018) 705., [2] Y. Fukaya et al., *Appl. Phys. Express* **7** (2014) 056601., [3] Z. Mitura et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **8** (1996) 8717., [4] K. Wada et al., *Eur. Phys. J. D* **66** (2012) 37., and [5] M. Maekawa, et al., *Eur. Phys. J. D* **68** (2014) 165.

*臨界角 θ_c は物質によって異なるが通常 2~3° 程度。全反射領域とブラッグ反射領域が十分に重なり構造解析に好都合な条件が揃うのは、全量子ビームで陽電子だけの特徴である。