

低仕事関数で表面の反応性が低い材料の設計に関する考察

Designing of Low Work Function Materials without High Surface Reactivity

物材機構¹ ○吉武 道子¹

NIMS¹, °Michiko Yoshitake¹

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

仕事関数は、電子放出源や各種デバイスの電極材料の選択に重要な物理的性質の一つである。その値は固体中に束縛されている電子のエネルギーにより決定されるため、材料による違いはあるものの値の幅は限られている。一般に、仕事関数が低いということは最も弱く固体中に束縛されている電子のエネルギーが小さいということで、別の原子との反応によりエネルギーが安定化しやすく、表面の反応性が高いことが多い。低仕事関数の電極材料としてよく用いられる遷移金属炭化物・窒化物の表面構造と仕事関数における炭素・窒素の役割、電子源材料として用いられる LaB_6 の表面構造と仕事関数における B の役割、金属単体の仕事関数との比較により、低仕事関数で表面の反応性が低い材料の設計に関して考察する。

遷移金属炭化物・窒化物の(100)面の仕事関数は、ジェリウムモデルにおけるウィグナーザイツセル半径でよく説明でき、炭素・窒素欠陥の導入に敏感でないことは、電子雲の広がりから説明できる。 LaB_6 (100)面の断面図を見ると、La 原子が表面にあり、遷移金属炭化物・窒化物と同様なメカニズムによる低仕事関数が実現していることが推測される。そこで、まずは、遷移金属炭化物より遷移金属窒化物の仕事関数が低い理屈を、 LaB_6 へ適用することを考えた。それは、6つの B の一つを C (原子番号が一つ大きい元素) で置換することで、置換によるバルクエネルギー変化を第一原理計算で求めたところ、予想通り、置換したほうが仕事関数のバルク項は小さくなることが分かった。

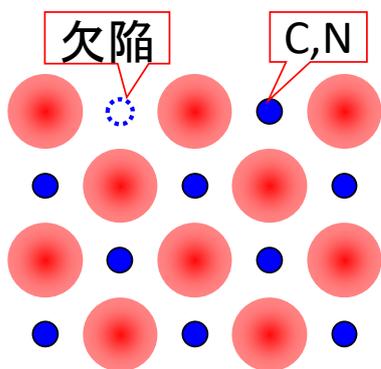


図1 遷移金属炭化物・窒化物の(100)面を側面から見た図

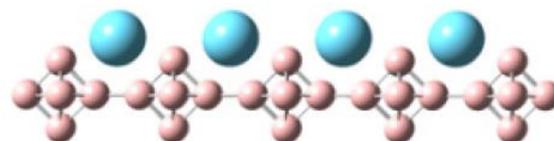


図2 LaB_6 の(100)面を側面から見た図。大きな丸がLaでBが正八面体を形成してカウンターアニオンとなっている。