

遷移金属炭化物の炭素欠損：仕事関数と密度

Transition Metal Carbides with Carbon Deficiency: Work Function and Density

物材機構¹ ○吉武 道子¹

NIMS¹, °Michiko Yoshitake¹

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

遷移金属炭化物・窒化物は、仕事関数が比較的低い割には反応性が低い材料である。これらの化合物は大きな金属原子の隙間に小さい炭素や窒素の原子が侵入した構造をしており、炭素や窒素が一部欠損しても構造を保ち続ける不定比化合物で、合成・成膜プロセスにより組成が 1:1 からずれた材料が作製されることが多い。炭素や窒素が欠損すると仕事関数の値は影響を受ける。既存の 2 つの(100)面における実験結果及び第一原理計算結果は、TaC と HfC とで炭素欠損の仕事関数に与える影響が全く逆であることを示している[1,2]。先に、仕事関数を決定づける要因の解析を行って、遷移金属炭化物・窒化物の系では炭素欠損による仕事関数の増減が、ビッカース硬度の増減により予測できることを示した[3]。

発表者は、物性間の関係性をデータとする知識データベースを企業との共同研究により構築している[4]。そのアップデート版（データ作成が全自動）において、先に発表者が手作業で行った仕事関数とビッカース硬度の関係が、自動生成データベースにおいても見られることを確認した上で、ビッカース硬度とは別の物性との関係性を探索した。その結果、密度が候補に挙がった。そこで、遷移金属炭化物の炭素欠損と X 線回折により得られた格子定数から計算した密度の関係を調査した結果、Fig. 1 に示すように、炭素欠損による密度の変化はビッカース硬度の変化と非常によく一致した。結果をもとに考えれば、バルクの結合強さが密度に反映することは妥当であり、ビッカース硬度の値が無くても X 線回折による格子定数の値のみから仕事関数の増減が予測できると考えられる。

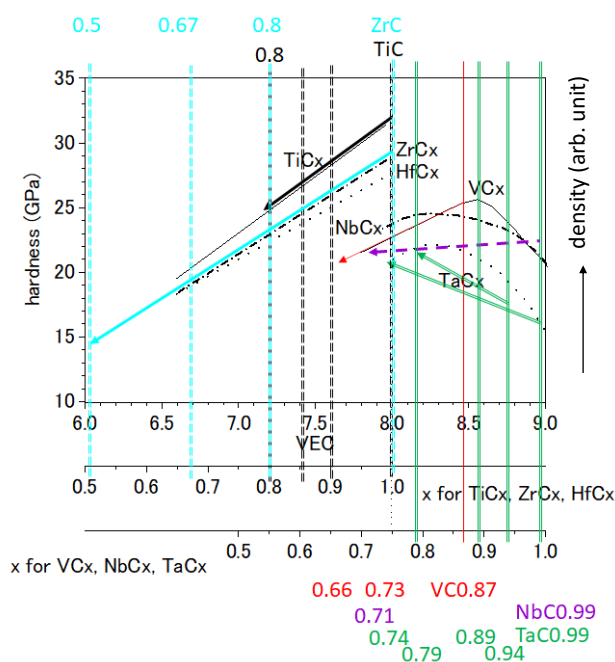


Fig. 1 Change of density due to carbon deficiency along with hardness.

[1] G. R. Gruzalski, S.-C. Lui, and D. M. Zehner, Surf. Sci. Lett. 239, L517 (1990).

[2] D. L. Price, B. R. Cooper, and J. M. Wills, Phys. Rev. B 48, 15311 (1993).

[3] M. Yoshitake, J. Vac. Sci. Technol. A32, 061403 (2014).

[4] M. Yoshitake, F. Sato, and H. Kono, J. Surf. Anal., 27, 22 (2020).