

IV 族遷移金属水素化物および窒化物の薄膜成長と仕事関数評価

Thin-film growth and work-function characterizations of group IV transition-metal hydrides and nitrides

東工大物質理工学院¹, 元素戦略² ○(M2)曹子陽¹, 林 遼一郎¹, 相馬 拓人¹, 大友 明^{1,2}Tokyo Tech., Dept. Chem. Sci. Eng.¹, MCES², ○Z. Cao¹, R. Hayashi¹, T. Soma¹, A. Ohtomo^{1,2}

E-mail: cao.z.aa@m.titech.ac.jp

【はじめに】他の元素に比べて小さな水素は、分子から原子への解離反応を通じて気相から固体内へ容易に拡散する。水素の作用は、表面や界面への凝集とそれに伴うポテンシャル変化であり、その変化を電氣的に検出することで水素センサーとしての応用が可能である [1]。本研究では、金属化合物の仕事関数が水素の作用でどの程度変化するか直接的に見積もることを目的とした。水素からアニオン交換しても金属伝導を保持しうる IV 族遷移金属元素 ($M = \text{Ti, Zr, Hf}$) に着目し、金属とその化合物の薄膜における仕事関数制御の可能性を探った。その結果、水素化物と窒化物との間で大きな仕事関数の差を確認したので報告する。

【実験】 N_2 , H_2 およびそれらのプラズマ種を気相原料に用いたパルスレーザー堆積 (PLD) 法によって IV 族水素化物と窒化物の(111)配向膜を作製し、接触電位差 (CPD) の参照物質として表面に Au ドット電極を堆積した。走査型ケルビンプローブ顕微鏡 (KPFM) により CPD を定量的に評価した。また、密度汎関数理論 (DFT) 計算により IV 族化合物の仕事関数を評価した。

【結果と考察】 TiH_x や TiN と Au 境界付近の領域で得られた CPD 画像と表面電位分布 (Fig. 1) から、両者の仕事関数が明らかになり、それらの差 ($\Delta\phi$) は 0.31 eV に達した。一方、(111)面のスラブモデルを作成し DFT 計算を行うと、 $\Delta\phi = 0.32$ eV と実験値に近い値が得られた。この結果は、仕事関数はアニオンとの結合性に強く依存し、N-H 交換することで大きな $\Delta\phi$ を実現できることを示している。Table I に Zr や Hf の結果とともにまとめる。

【謝辞】KPFM 測定にご協力いただきました東京工業大学オープンファシリティセンター分析部門に深く感謝いたします。

[1] T.-H. Tsai *et al.*, *Sens. Actuators B* **129**, 292 (2008)

Table I. Work functions for $M\text{H}_x$ and $M\text{N}$ epitaxial films obtained by KPFM measurement (DFT calculation). Literature data obtained with various methods and sample forms are also listed.

M	Work function (eV)					
	literature data			this study		
	M	$M\text{N}$	$M\text{H}_2$	$M\text{N}$	$M\text{H}_x$	$\Delta\phi$
Ti	4.33	4.7	4	5.07 (4.93)	4.76 (4.61)	0.31 (0.32)
Zr	4.05	4.6	3.82	5.04 (4.36)	4.79 (4.36)	0.35 (0.22)
Hf	3.9	4.7	N/A	5.05 (4.48)	4.68 (4.26)	0.37 (0.22)

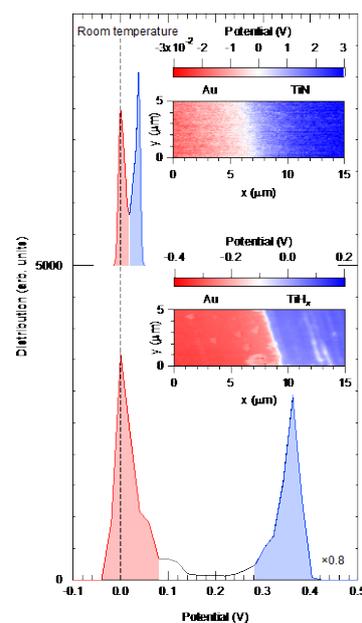


Fig. 1. The distributions of CPD of TiH_x (bottom) and TiN (top). Inset shows CPD images.