Fri. Nov 20, 2020

B会場

表面科学(SS1)物性

[2Ba] 表面科学(SS1)物性 座長:高山あかり・虻川 匡史 9:00 AM - 12:00 PM B会場

[2Ba01S] Particle size dependence of annealing treatment on electronic structure of ZnO nanoparticles
○菊池武文¹¹,吉田弘幸²٬³¹,奥平幸司³¹(¹¹千葉大院融
合理工,²¹千葉大分子キラリティ研究センター,³¹千葉大
院工)

9:00 AM - 9:15 AM

[2Ba02S] Evaluation of effective mass change by quantization by first principles calculation 〇南興¹⁾, Mangold Maxmilian²⁾, 武田さくら¹⁾ (¹⁾奈良 先端大, ²⁾レーゲンスブルク大学) 9:15 AM - 9:30 AM

[2Ba03S] Electrical observation of magnetic skyrmions in the ferromagnetic topological insulator Mn(Bi_{1-x}Sb_x)₂Te₄/(Bi_{1-x}Sb_x)₂Te₃/Mn(Bi_{1-x}Sb_x)₂Te₄ 〇高城拓也¹⁾,秋山了太¹⁾,Kibirev Ivan^{2,3)},Matetskiy Andrey^{2,3)},遠山晴子¹⁾,中西亮介¹⁾,樋渡功太¹⁾,平原徽⁴⁾,深澤拓朗⁴⁾,Zotov Andrey^{2,3)},Saranin Alexander^{2,3)},長谷川修司¹⁾(¹⁾東大院理) 9:30 AM - 9:45 AM

[2Ba04S] Mg deposition induced change of structure and electronic properties of Pb/Si(111) surface 〇寺川成海¹⁾,八田振一郎¹⁾,奥山弘¹⁾,有賀哲也¹⁾ (¹⁾京大院理)

9:45 AM - 10:00 AM

[2Ba05S] Step-indeced enhancement of the critical magnetic field for Pb atomic layer superconductor formed on Si(111) vicinal surface

> ○佐藤優大¹⁾,土師将裕¹⁾,吉澤俊介²⁾,内橋隆²⁾,長谷 川幸雄¹⁾(¹⁾東大物性研,²⁾物材機構) 10:00 AM - 10:15 AM

[2Ba06S] Coexistence of Kondo effect induced by H absorption and Anderson localization in Pd ultrathin film

> 〇小澤孝拓¹⁾,笹原悠輝²⁾,清水亮太²⁾,一杉太郎²⁾,福 谷克之^{1,3)}(¹⁾東大生研,²⁾東工大物質理工,³⁾原子力機 構先端研)

10:15 AM - 10:30 AM

[2Ba08] Electronic structure of Si(110)3x2-Bi surface

金野達¹⁾,勝俣錬¹⁾,木村彰博¹⁾,中村玲雄¹⁾,諸貫亮太¹⁾,山崎詩郎²⁾,小澤健一²⁾,間瀬一彦³⁾,飯盛拓嗣⁴⁾,小森文夫⁴⁾,平山博之²⁾,〇中辻寬¹⁾(¹⁾東工大物質理工,²⁾東工大理,³⁾KEK-PF,⁴⁾東大物性研)

[2Ba09] Electronic structure of ultrathin metal phthalocyanine films on In/Si(111) 〇八田振一郎¹⁾,松原燦¹⁾,奥山弘¹⁾,有賀哲也¹⁾(¹⁾京大院理)

11:00 AM - 11:15 AM

[2Ba10] ARPES study of twist-angle dependent electronic states in twisted bilayer graphene 飯盛拓嗣¹⁾, 今村均²⁾, VisikovskiyAnton²⁾, 魚谷亮介²⁾, 梶原隆司⁶⁾, 宮町 俊生³⁾, 服部琢磨¹⁾, 原沢あゆみ¹⁾, 矢治光一郎⁴⁾, 中辻寛⁵⁾, 北村未歩⁶⁾, 堀場弘司⁶⁾, 間瀬一彦⁶⁾, 田中悟²⁾, 〇小森文夫¹⁾ (¹⁾東大物性研, ²⁾九大工, ³⁾電通大情報理工, ⁴⁾物材機構, ⁵⁾東工大物質理工, ⁶⁾高エネ研物構研) 11:15 AM - 11:30 AM

[2Ba11] Electron state of Pb-intercalated graphene on SiC substrate with different number of sheets

○高山あかり¹⁾,横井佑典¹⁾,辻川夕貴¹⁾(¹⁾早稲田大)
11:30 AM - 11:45 AM

[2Ba12] UVSOR photoelectron momentum microscope: local electronic structure analysis station 〇松井文彦¹⁾, 牧田誠二¹⁾, 松田博之¹⁾, 岡野泰彬¹⁾, 矢野隆行¹⁾, 中村永研¹⁾, 出田真一郎^{1,2)}, 田中清尚^{1,2)}, 長谷川友里²⁾, 菅滋正^{3,4)}, 解良聡^{1,2)} (¹⁾分子研極端紫外光研究施設, ²⁾総研大, ³⁾阪大産研, ⁴⁾ユーリッヒ研究所) 11:45 AM - 12:00 PM

表面科学(SS1)物性

[2Bp] 表面科学(SS1)物性 座長: 松田 巌·荒船 竜一 1:00 PM - 3:30 PM B会場

[2Bp01] Measuring the conduction band of Ta₂NiSe₅ using low energy inverse photoelectron spectroscopy

〇川村啓太¹⁾, 佐藤晴輝¹⁾, 折尾響¹⁾, 杉本高大²⁾, 太田幸則³⁾, 大槻太毅⁴⁾, 吉田鉄平⁴⁾, 丸岡うらら⁵⁾, 中埜彰俊⁵⁾, 寺崎一郎⁵⁾, 吉田弘幸^{6,7)} (¹⁾千葉大院融合理工, ²⁾慶應大理工, ³⁾千葉大院理, ⁴⁾京大院人間・環境, ⁵⁾名大院理, ⁶⁾千葉大院工, ⁷⁾千葉大学分子キラリティ研究センター)

1:00 PM - 1:15 PM

[2Bp02S] Conduction band structures of HOPG studied

by angle-resolved low energy inverse photoelectron spectroscopy

〇折尾響¹⁾,佐藤晴輝¹⁾,Abd Rahman Syed A.¹⁾,川村 啓太¹⁾,吉田弘幸^{2,3)}(¹⁾千葉大院融合理工,²⁾千葉大院工,³⁾千葉大分子キラリティ研究センター)

1:15 PM - 1:30 PM

- [2Bp03S] Enhancement of signal intensity for inverse photoelectron spectroscopy of organic semiconductor measurement by grating-coupled surface plasmon resonance 〇柴田幸輝¹⁾, 千田雛子²⁾, 田和圭子²⁾, 吉田弘幸^{3,4)} (¹⁾千葉大院融合理工, ²⁾関西学院大理工, ³⁾千葉大院工, ⁴⁾千葉大分子キラリティー研究センター) 1:30 PM 1:45 PM
- [2Bp04] Hybridization vs decoupling: Influence of an h-BN interlayer on the physical properties of a lander-type molecule on Ni(111)

 ○相原巧実¹¹, Maximilian Schaal²², Felix Otto²¹, Marco Grünewald²¹, Torsten Fritz²¹, 吉田弘幸³٬⁴)(¹¹千葉大院融合理工,²¹イェーナ大学,³³千葉大分子キラリティセンター,⁴³千葉大院工)
 1:45 PM 2:00 PM
- [2Bp05] Measurement of energy band structure of the lowest unoccupied molecular orbital of organic semiconductor

 ○佐藤晴輝¹⁾, 折尾響¹⁾, 石井宏幸²⁾, 吉田弘幸^{3,4)}

 (¹⁾千葉大院融合理工, ²⁾筑波大数理物質, ³⁾千葉大院工, ⁴⁾千葉大分子キラリティ研究センター)
 2:00 PM 2:15 PM
- [2Bp07] Relationship between the resistance enhancement and H concentration in NdNiO₃ thin film O西谷侑将¹⁾,小澤孝拓¹⁾,Sidik Umar²⁾,服部梓²⁾,田中秀和²⁾,福谷克之^{1,3)}(¹⁾東大生研,²⁾阪大産研,³⁾原子力機構先端研)
 2:30 PM 2:45 PM
- [2Bp08] Interpretation of correlation between nano-scale real contact and friction based on stacking structure

 〇平尾佳那絵¹⁾,岡本遼路¹⁾,大向秀弥¹⁾,佐々木成朗¹⁾

 (¹⁾電通大院情報理工)

 2:45 PM 3:00 PM
- [2Bp09S] Amonton-Coulomb's Law of The Interface of Multi-Layered C_{60} Bearing System O梶皓彦 $^{1)}$,岡本遼路 $^{1)}$,渡邉章嗣 $^{1)}$,三浦浩治 $^{2)}$,鈴木 勝 $^{1)}$,佐々木成朗 $^{1)}$ ($^{1)}$ 電通大院情報理工, $^{2)}$ 愛知教育大

物理)

3:00 PM - 3:15 PM

表面科学(SS1)物性

[2Ba] 表面科学(SS1)物性

座長:高山 あかり・虻川 匡史

Fri. Nov 20, 2020 9:00 AM - 12:00 PM B会場

[2Ba01S] Particle size dependence of annealing treatment on electronic structure of ZnO nanoparticles

〇菊池武文 1 , 吉田弘幸 2,3 , 奥平幸司 3 (1 千葉大院融合理工, 2 千葉大分子キラリティ研究センター, 3 千葉大院工)

9:00 AM - 9:15 AM

[2Ba02S] Evaluation of effective mass change by quantization by first principles calculation

○南興¹⁾, Mangold Maxmilian²⁾, 武田さくら¹⁾ (¹⁾奈良先端大, ²⁾レーゲンスブルク大学) 9:15 AM - 9:30 AM

- [2Ba03S] Electrical observation of magnetic skyrmions in the ferromagnetic topological insulator Mn(Bi_{1-x}Sb_x)₂Te₄/(Bi_{1-x}Sb_x)₂Te₃/Mn(Bi_{1-x}Sb_x)₂Te₄ ○高城拓也¹¹,秋山了太¹¹,Kibirev Ivan²ҳ³,Matetskiy Andrey²ҳ³,遠山晴子¹¹,中西亮介¹¹,樋渡功太¹¹,平原徽⁴,深澤拓朗⁴,Zotov Andrey²ҳ³,Saranin Alexander²ҳ³,長谷川修司¹¹(¹¹東大院理)9:30 AM 9:45 AM
- [2Ba04S] Mg deposition induced change of structure and electronic properties of Pb/Si(111) surface

〇寺川成海¹⁾,八田振一郎¹⁾,奥山弘¹⁾,有賀哲也¹⁾ (¹⁾京大院理) 9:45 AM - 10:00 AM

[2Ba05S] Step-indeced enhancement of the critical magnetic field for Pb atomic layer superconductor formed on Si(111) vicinal surface 〇佐藤優大¹⁾,土師将裕¹⁾,吉澤俊介²⁾,内橋隆²⁾,長谷川幸雄¹⁾(¹⁾東大物性研,²⁾物材機構) 10:00 AM - 10:15 AM

[2Ba06S] Coexistence of Kondo effect induced by H absorption and Anderson localization in Pd ultrathin film

〇小澤孝拓 $^{1)}$,笹原悠輝 $^{2)}$,清水亮太 $^{2)}$,一杉太郎 $^{2)}$,福谷克之 $^{1,3)}$ ($^{1)}$ 東大生研, $^{2)}$ 東工大物質理工, $^{3)}$ 原子力機構先端研)

10:15 AM - 10:30 AM

[2Ba08] Electronic structure of Si(110)3x2-Bi surface 金野達¹⁾,勝俣錬¹⁾,木村彰博¹⁾,中村玲雄¹⁾,諸貫亮太¹⁾,山崎詩郎²⁾,小澤健一²⁾,間瀬一彦³⁾,飯盛 拓嗣⁴⁾,小森文夫⁴⁾,平山博之²⁾,〇中辻寬¹⁾(¹⁾東工大物質理工,²⁾東工大理,³⁾KEK-PF,⁴⁾東大物性 研)

10:45 AM - 11:00 AM

[2Ba09] Electronic structure of ultrathin metal phthalocyanine films on In/Si(111) 〇八田振一郎¹⁾,松原燦¹⁾,奥山弘¹⁾,有賀哲也¹⁾(¹⁾京大院理) 11:00 AM - 11:15 AM

[2Ba10] ARPES study of twist-angle dependent electronic states in twisted bilayer graphene

飯盛拓嗣 1),今村均 2),VisikovskiyAnton 2),魚谷亮介 2),梶原隆司 6),宮町 俊生 3),服部琢磨 1),原沢 あゆみ 1),矢治光一郎 4 ,中辻寛 5 ,北村未歩 6 ,堀場弘司 6 ,間瀬一彦 6 ,田中悟 2 ,〇小森文夫 1)(1 東大物性研, 2 九大工, 3 電通大情報理工, 4 物材機構, 5 東工大物質理工, 6 高エネ研物構研)

11:15 AM - 11:30 AM

[2Ba11] Electron state of Pb-intercalated graphene on SiC substrate with different number of sheets

〇高山あかり¹⁾, 横井佑典¹⁾, 辻川夕貴¹⁾ (¹⁾早稲田大)

11:30 AM - 11:45 AM

[2Ba12] UVSOR photoelectron momentum microscope: local electronic structure analysis station

〇松井文彦¹⁾,牧田誠二¹⁾,松田博之¹⁾,岡野泰彬¹⁾,矢野隆行¹⁾,中村永研¹⁾,出田真一郎^{1,2)},田中清尚^{1,2)},長谷川友里²⁾,菅滋正^{3,4)},解良聡^{1,2)} ($^{1)}$ 分子研極端紫外光研究施設, $^{2)$ 総研大, $^{3)}$ 阪大産研, $^{4)}$ ユーリッヒ研究所)

11:45 AM - 12:00 PM

ZnO ナノ粒子の電子構造におけるアニール処理の粒子径依存性の解明

○菊池 武文1, 吉田 弘幸2,3, 奥平 幸司3*

1千葉大学大学院融合理工学府,2千葉大学分子キラリティ研究センター,3千葉大学大学院工学研究院

Particle size dependence of annealing treatment on electronic structure of ZnO nanoparticles

OTakefumi Kikuchi¹, Hiroyuki Yoshida^{2,3} and Koji Okudaira^{3*}

¹Graduate School of Science and Engineering, Chiba University, ²Molecular Chirality Research Center, Chiba University, ³Graduate School of Engineering, Chiba University

1. 序論

n 型の直接遷移半導体である酸化亜鉛(ZnO)は、透明性と大気安定性の高さから有機薄膜太陽電池(OSC)の電子輸送層などに用いられてきた[1]。さらに近年、溶液プロセスによる成膜が可能な ZnO の低次元成長ナノ粒子を用いて、フレキシブル性を損なわない高機能な OSC の研究が行われている[2]。

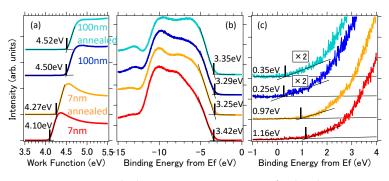
一方、ナノ粒子は粒子径に依存した量子サイズ効果や、比表面積の増大による表面状態の影響により特異な電子状態となることが知られている。これまで、ナノ粒子の電子状態に関する研究は、実験的には主に光学分光が用いられてきた。これは、同一粒子での光学遷移を観測するため、各電子準位の相対間隔を評価している。しかし、OSCにおける電子・ホール輸送層の特性を議論するには、フェルミ準位に対する伝導帯下端や価電子帯上端の絶対エネルギー位置の情報が不可欠である。そこで本研究では、デバイス応用を見据えてZnOナノ粒子の価電子帯・伝導帯両方の電子構造を明らかにした。

2. 実験

化学的な合成法[3,4]により 2 種類の ZnO ナノ粒子を作製した。透過型電子顕微鏡(TEM)の像より平均的な粒子 径が約 7 nm と約 100 nm であった。それぞれを ITO 基板上にスピンコートにより成膜したものと、成膜後に大気 中で 120 $^{\circ}$ Cのアニール処理をしたものについて、分子科学研究所 UVSOR の BL-2B を用いた紫外光電子分光法 (UPS: hv=28 eV, 40 eV)で価電子帯を、低エネルギー逆光電子分光法(LEIPS)[5]で伝導帯を測定した。さらに、伝導帯を構成する電子準位の元素依存性を明らかにするために、吸収端近傍 X 線吸収微細構造(NEXAFS)の測定を行った。Zn L-edge の測定には UVSOR の BL-2A を、O K-edge の測定には Photon Factory の BL-11A を用いた。

3. 結果と考察

UPS(hv=28 eV)と LEIPS の結果を Fig. 1 に示す。アニール処理によって、7 nm は(a)より仕事関数が 0.17 eV、(b)(c)より バンドギャップが 0.36 eV 変化した。これに対して 100 nm ではほとんど変化しなかった。これは粒子径の小さなナノ粒子では、表面欠損や表面への吸着などの表面状態の変化の影響が大きいためと考えられる。また、粒子径が小さい 7 nm では 100 nm よりもバンドギャップが広



では 100 nm よりもバンドギャップが広 **Fig. 1**. (a)UPS 二次電子カットオフ (b)UPS 価電子帯 (c)LEIPS く観測され、量子サイズ効果によるバンドギャップの広がりと解釈できるが、その主となる要因が伝導帯側にあると言える。本講演では **NEXAFS** の結果を交えて、伝導帯の電子構造についても詳細に議論する予定である。

[1] A.J. Heeger et al., Adv. Mater. 23 1679-1683 (2011) [3] K.Samarahan et al., Acta Chim. Slov. 65 578-585 (2018)

[2] D. Lee et al., J Phys Chem Solids. 105 66-7 (2017) [4] Y.Zhu et.al., Chem. Lett. 33 No.6 (2004)

[5] H. Yoshida, Chem. Phys. Lett. **539-540**, 180-185 (2012)

*E-mail: okudaira@faculty.chiba-u.jp

第一原理計算を用いた量子化による有効質量変化の評価

○南 興¹, , Mangold Maximilian², 武田 さくら ^{1*}

1奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科 2レーゲンスブルク大学

Evaluation of effective mass change by quantization by first principles calculation

OKo Minami¹, Mangold Maximilian², and Sakura N. Takeda^{1*}

¹Nara Institute of Science and Technology(NAIST) ²University of Regensburg

- 【1. はじめに】現在の極微細 CMOS ではチャネル反転層の深さは数 nm オーダーに達している。そのためチャネル中の電子状態はキャリア反転層中深さ方向に閉じ込められ、いわゆるサブバンドとなる。従来、サブバンド分散はバルクバンド分散と同じ[1]として CMOS 開発が進められてきた。ところが近年、p型反転層中で量子化された 2 次元ホールサブバンド(2DHS)の分散を角度分解光電子分光(ARPES)で測定した結果[2,3]から、Si のサブバンド面内分散がバルク面内分散ではなくバルクバンド射影端(PBBE)と極めて近い面内分散を持つこと、およびそのメカニズムが報告された。この量子化によるバンド変調は、結晶一般で普遍的に生じることが明らかになった。そこで本研究では第一原理計算を用い、量子化が半導体、金属のバンド分散に与える影響を網羅的に調べた。さらにバンド変調の閉じ込め方向依存性を調べた。
- 【3. 結果】計算したほどんとの結晶で量子化による有効質量の変化が見られた。SiC(0001)のみ、有効質量の変化が起こらなかった。Fig.1 にSiについて kx を[001]に固定し、kz を[110]、[340]、[120]、[140]、[010]に設定したバルクバンド曲面を示す。得られたバルクバンド曲面から有効質量を算出した結果、計算した kz 方向すべてで有効質量が量子化によって増大することを見出した。また、kz 方向が[110]から[010]にいくにつれて有効質量が単調増加することを見出した。

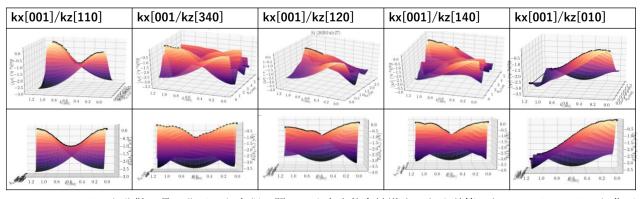


Fig. 1. Si[001]バンド分散の量子化バンド変調の閉じ込め方向依存性導出のため計算した Si のバルクバンド曲面。

- 【4. 文献】1) J. R Schrieffer, in *Semiconductor Surface Physics*. (edited by R. H. Kingston, University of Pennsylvania Press, 1957), pp. 55–69.
- 2) S. N. Takeda, N. Higashi, and H. Daimon, Phys. Rev. Lett., 94, 037401 (2005).
- 3) S.N.Takeda, A.Kuwako, M.Nishide, H. Daimon, Phys. Rev. B 93, 125418 (2016).

^{*}E-mail: sakura@ms.naist.ip

磁性/非磁性/磁性トポロジカル絶縁体サンドイッチ構造

における磁気スキルミオンの電気的観測

¹東京大学理学部, ²Institute of Automation and Control Processes, ³Far Eastern Federal University, ⁴東京工業大学理学部 ○高城拓也^{1*}, 秋山了太¹, I. A. Kibirev^{2, 3}, A. V. Matetskiy^{2, 3}, 遠山晴子¹, 中西亮介¹, 樋渡功太¹, 平原徹⁴, 深澤拓朗⁴, A. V. Zotov^{2, 3}, A. A. Saranin^{2, 3}, 長谷川修司¹

Electrical observation of magnetic skyrmions in the ferromagnetic topological insulator $Mn(Bi_{1-x}Sb_x)_2Te_4/(Bi_{1-x}Sb_x)_2Te_3/Mn(Bi_{1-x}Sb_x)_2Te_4$

OT. Takashiro^{1*}, R. Akiyama¹, I. A. Kibirev^{2,3}, A. V. Matetskiy^{2,3}, H. Toyama¹, R. Nakanishi¹, K. Hiwatari¹, T. Hirahara⁴, T. Fukasawa⁴, A. V. Zotov^{2,3}, A. A. Saranin^{2,3} and S. Hasegawa¹

1the University of Tokyo, ² Institute of Automation and Control Processes,

³Far Eastern Federal University, ⁴Tokyo Institute of Technology

強いスピン軌道相互作用と磁化を有した強磁性トポロジカル絶縁体(FMTI)の表面・界面では、トポロジカルに非自明な渦状磁気構造(磁気スキルミオン: 磁気Sk)が形成されることがあり、これらは熱揺らぎなどの外乱に対して強固なトポロジカル不変量を持つため次世代磁気メモリへの応用などとしても注目されている。この磁気スキルミオンは内部磁場を有しており(創発磁場)、それにより伝導電子が散乱を受ける。これをトポロジカルホール効果(THE)といい、最近では磁性元素がドープされたFMTIで、磁気Skの磁化が反転する磁場でホール抵抗のピークを持つTHEを観測したとの報告がある[1,2]。一方、磁性元素ドープ系では結晶性の低下や磁化の不均一性といった課題があることから、近年では磁性元素Mnが層内均一に配列したFMTI層(MnBi₂Te₄, Mn(Bi,Sb)₂Te₄など)を用いて結晶コヒーレンス向上を図った研究が盛んに報告されているが[3]、隣接するFMTIが互いに近い場

合、反強磁性交換相互作用(AFM)が強く働くため、磁気Sk形成を 妨げる恐れがある(図1(a))。

そこで我々は、図1(b)のように上述の2層のFMTIを非磁性TI層 (Bi,Sb)₂T₃で分離したFMTI/TI/FMTIサンドイッチ構造を用いて AFMを抑制し、TIの上下界面で形成されると期待される磁気Sk の電気的観測を目指した。図1 (c)のホール抵抗の磁場依存性では、FM由来の異常ホール効果(AHE)に加え低磁場付近に、矢印で示す凸形状の振る舞いが見られた。この磁場は図1(d)に示した磁気抵抗のピーク位置に対応していることから、図1(c)は形成された磁気Skの磁化の保磁力に相当する磁場であることを示す、THEであることが分かった。本講演では更に、キャリア密度・膜厚依存性評価等の系統的なデータを用いて詳細に議論する。[1] K. Yasuda, et al., Nat. Phys. 12, 555-559 (2016). [2] C. Liu, et al., PRL. 119, 176809 (2017). [3] B. Chen, et al., Nat. Comm. 10, 4469 (2019).

図 1(a)多層 FMTI および(b)本系の概要図。 (c)本系で観測された異常ホール効果および(b)磁気抵抗。磁化が反転する位置(白の矢印)で THE が確認される。

⁴⁰⁰ (a)多層Mn(Bi,Sb)₂Te₄ $\widehat{\mathbf{G}}$ 200 PAHE + PTHE -200 -400 T = 0.5 K(b)サンドイッチ構造 (本系) (d) ₂₀₀ $\rho_{\rm xx}(B) - \rho_{\rm xx}(0) (\Omega)$ (Bi,Sb)₂Te₃ -200 T = 0.5 K-400 0.0 -0.4 0.4

^{*}E-mail: takashiro@surface.phys.s.u-tokyo.ac.jp

Mg 吸着による Pb/Si(111)表面の構造と電子状態の変化

○寺川 成海, 八田 振一郎, 奥山 弘, 有賀 哲也*

京都大学大学院理学研究科

Mg deposition induced change of structure and electronic properties of Pb/Si(111) surface

○Shigemi Terakawa, Shinichiro Hatta, Hiroshi Okuyama and Tetsuya Aruga*

Graduate School of Science, Kyoto University

半導体表面上の金属超薄膜は,低次元金属特有の物性研究を行う理想的な系である。近年では,2種類以上の金属元素を共吸着させた表面の研究も盛んに進められており,ラシュバ効果によるスピン分裂した金属的表面状態バンドを持ち,かつ超伝導を発現する(TI, Pb)/Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 構造 11 など,興味深い物性を持つ表面合金相が発見されている。本研究では,新規表面合金相の作製を目的として Pb と Mg を Si(111)基板に吸着させた系に注目した。

Pb/Si(111) Striped incommensurate (SIC)相は被覆率約 $1.3 \, \text{ML}$ の単原子層 $2 \, \chi$ 元金属であり 2 , 約 $1 \, \text{K}$ で超伝 導転移する $^{3.4}$ ことが知られている。ここに Mg を蒸着 することで生じる構造および電子状態の変化を,それ ぞれ 低速電子 回折 (LEED) と 角度 分解 光電子分光 (ARPES)を用いて調べた。

Pb/Si(111) SIC 相(Fig. 1(a))に室温で Mg を蒸着すると、SIC 相のスポットは消え、Mg 蒸着量の増加に伴い、(4×4)構造((b)、Mg 被覆率 0.2 ML)、"(5×5)"不整合構造((c)、0.5 ML)、(6×6)構造((d)、1.2 ML)、(2×2)構造((e)、2.5 ML)へと変化した。"(5×5)"構造では各(1×1)スポットの周囲に 6 点のスポットが見られ、その位置は Mg蒸着量に応じて(4×4)から(6×6)へと(1×1)スポットに近づくように連続的に変化した。また、(6×6)構造を200 °C以下で加熱すると、c(4×2)構造(Fig. 1(f))に変化することがわかった。

作製したそれぞれの構造について ARPES を用いて電子状態を測定した。 (4×4) 構造と (6×6) 構造ではフェルミ準位を横切るバンドが観測され、金属的であることがわかった。一方、 $c(4\times2)$ 構造は半導体的な電子状態を持つことがわかった。また、一連の構造変化に伴う仕事関数変化を調べた。Mg 吸着により SIC 表面の仕事関数は減少するが、 (4×4) 構造の完成後に一旦増加に転じ、" (5×5) "構造の被覆率で極大値を示した後、再度

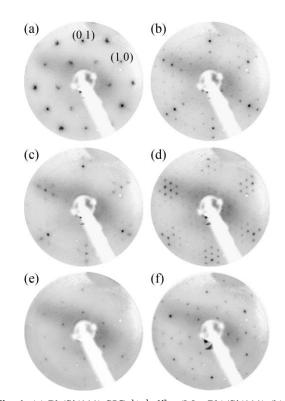


Fig. 1. (a) Pb/Si(111) SIC および, (Mg, Pb)/Si(111) (b) (4×4), (c) "(5×5)", (d) (6×6), (e) (2×2), (f) c(4×2)の LEED パターン(室温, E_p = 70 eV (a-d, f),65 eV (e))。

減少に転じ, (2×2)構造の完成後にバルク Mg の仕事関数の値に収束するという構造変化に対応した特徴的な変化を示すことがわかった。

文 献

- 1) A.V. Matetskiy *et al.*, Phys. Rev. Lett. **115**, 147003 (2015)
- 2) C. Brand et al., Phys. Rev. B 96, 035432 (2017).
- 3) T. Zhang et al., Nat. Phys. 6, 104 (2010).
- 4) M. Yamada et al., Phys. Rev. Lett. 110, 237001 (2013).

*E-mail: aruga@kuchem.kyoto-u.ac.jp

Si(111)微傾斜面上の Pb 単原子層超伝導体における ステップ誘起臨界磁場増大効果

Step-induced enhancement of the critical magnetic field for Pb atomic-layer superconductor formed on Si(111) vicinal surface

○ Yudai Sato¹*, Masahiro Haze¹, Shunsuke Yoshizawa², Takashi Uchihashi², and Yukio Hasegawa¹
¹Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo, ²National Institute for Materials Science

超伝導体研究において、高い臨界磁場を持つ物質を 探索することは大きな課題の一つである。臨界磁場は、 超伝導を特徴づける長さであるコヒーレンス長の2乗 に逆比例することが知られているため、コヒーレンス 長の抑制によって臨界磁場の増大が見込まれる。金属 単原子層超伝導相は、最表面で超伝導が発現している ため、ステップはその超伝導特性に大きな影響を与え る。実際、In-√7×√3 単原子層超伝導体では、ステップ 構造がテラス間の結合を弱め、ジョセフソン接合とし て機能することが報告されている[2]。また、Si(111)表 面上の Pb-√3×√43 単原子層超伝導体では、コヒーレン ス長より狭いテラスにおいて、ステップによる閉じ込 めによる面直臨界磁場の増大が観測されている[3]。し たがって、金属単原子層超伝導相におけるステップは コヒーレンス長を抑制する要因になることが予測され るが、実験的に明らかにされていない。

本講演では Si(111)微傾斜面上の Pb-SIC(Striped Incommensurate) 構造の面直臨界磁場の増大の起源を明らかにするため、走査トンネル顕微鏡(STM)および表面電気伝導測定により、その超伝導特性を評価した結果を報告する。微傾斜面上の Pb-SIC 構造では、コヒーレンス長より幅狭な間隔で並ぶステップが超伝導を乱し、ステップに垂直な方向のコヒーレンス長が実効的に短くなる結果として、ステップと平行方向に伸長した渦糸が観測された (Fig.1)。トンネル分光測定の磁場依存性より、面直臨界磁場が試料全面で増大することが明らかとなり、その結果は表面電気伝導測定からも再現された。その効果はコヒーレンス長に異方性を導入する、異方的ギンツブルグ・ランダウ理論を用いて定量的に説明された。

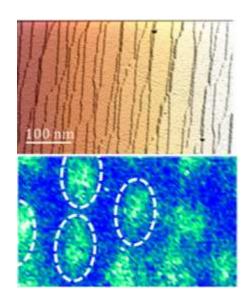


Fig. 1. 上図: Si(111)微傾斜面上の Pb-SIC 構造の STM 像。下図: 上図の領域で取得したゼロバイアスコンダ クタンス分布図。ステップ方向に伸長した渦糸が形成 され、コヒーレンス長に異方性があることが判る。

文 献

[1] T. Zhang et al., Nature Physics 6, 104 (2010) [2] S. Yoshizawa et al., Phys. Rev. Lett. 113, 247004 (2014) [3] 佐藤優大, *et al.*, 2019 年表面真空学会学術講演会, 1Hp09S (2019)

^{*}E-mail: vv22ai@issp.u-tokyo.ac.jp

Pd 超薄膜における水素誘起近藤効果とアンダーソン局在

○小澤 孝拓 ^{1*}, 笹原 悠輝 ², 清水 亮太 ², 一杉 太郎 ², 福谷 克之 ^{1,3}
¹東大生研, ²東工大物質理工学院, ³原子力機構先端研

Coexistence of Kondo effect induced by H absorption and Anderson localization in Pd ultrathin film

OTakahiro Ozawa^{1*}, Yuki Sasahara², Ryota Shimizu², Taro Hitosugi², Katsuyuki Fukutani^{1,3}

¹ Inst. Indust. Sci., Univ. of Tokyo, ² School of Materials and Chemical Technology, Tokyo Tech., ³Asrc, JAEA

低温での電気抵抗極小は、乱雑ポテンシャル系におけるアンダーソン局在や磁性不純物のスピンに起因する近藤効果に見られる現象である。水素は質量とサイズの小ささから格子間に侵入しやすく、その中程度の電気陰性度によって種々の物質と相互作用しやすい原子であり、物質自体の電気的、磁気的特性を変調させる可能性がある。パラジウム(Pd)は水素吸蔵に伴いその電気的性質が劇的に変化することで知られ、10 K未満の超伝導や50 K付近の抵抗異常を発現する[1,2].我々は、Pdを水素化することで近藤効果と考えられる抵抗極小が発現することを発見した[3]。今回、新たにPd 超薄膜水素化物において低温領域で二つの抵抗屈曲を見出した。それらについて二次元系におけるアンダーソン局在と近藤効果の共存の観点から報告する.

試料は室温にてスパッタ成膜した多結晶 Pd 薄膜を用い、200 K で水素ガス曝露によって水素化した.水素濃度の評価は昇温脱離法(TDS)を用いた. Fig. 1.に膜厚(a) 50 nm (b) 2 nm の PdH $_x$ の抵抗の温度依存性を示す. 膜厚 50 nm の試料は水素濃度 x=0.2 程度で 10 K 付近に抵抗極小を示し、濃度増加で高温側にシフトした.水素に起因した近藤効果によるものと考えられる. 一方、膜厚 2 nm の Pd 薄膜は 20 K 付近に抵抗の屈曲を示し、低温で logT に従って抵抗が増加した. アンダーソン局在に起因すると考えられる. さらに水素化によって高温側に新たな抵抗極小が現れ、水素濃度の増加とともに高温側にシフトした. 近藤効果によるものと考えられる. 抵抗極小温度の濃度依存性は、膜厚50 nm の試料より 2 nm の試料で大きいことがわかった.

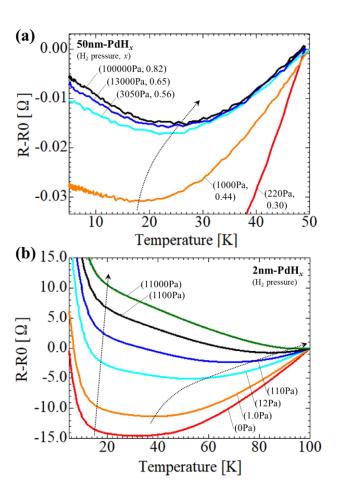


Fig. 1. (a) 膜厚 50 nm (b) 膜厚 2 nm の Pd 薄膜水素化物の抵抗の温度依存性. 矢印は抵抗の屈曲を示している. 添え字は H_2 ガスの圧力と TDS から見積もった水素濃度.

文 献

- [1] T. Skokiewicz et al., Phys. stat. sol., 30 (1968) K33.
- [2] T. Skokiewicz, Phys. stat. sol., (a)11 (1972) K123.
- [3] T. Ozawa et al., 日本表面真空学会学術講演会, 1Ha09S (2019).

^{*}E-mail: t-ozawa@iis.u-tokyo.ac.jp

Si(110)3×2-Bi 表面の電子状態

金野 達¹, 勝俣 錬¹, 木村 彰博¹, 中村 玲雄¹, 諸貫 亮太¹, 山崎 詩郎², 小澤 健一², 間瀬 一彦³, 飯盛 拓嗣⁴, 小森 文夫⁴, 平山 博之², ○中辻 寬^{1*}

 1 東京工業大学物質理工学院, 2 東京工業大学理学院, 2 KEK-PF, 2 東京大学物性研究所

Electronic structure of Si(110)3×2-Bi surface

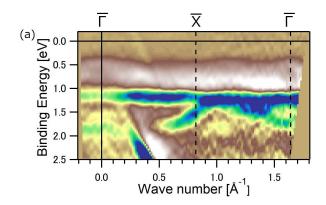
T. Konno¹, R. Katsumata¹, A. Kimura¹, L. Nakamura¹, R. Moronuki¹, S. Yamazaki², K. Ozawa², K. Mase³, T. Iimori⁴, F. Komori⁴, H. Hirayama², OK. Nakatsuji^{1*}

¹School of Materials and Chemical Technology, Tokyo Institute of Technology, ²School of Science, Tokyo Institute of Technology, ³KEK-PF, ⁴Institute for Solid State Physics, University of Tokyo

Bi が吸着した Si(111)等の半導体表面では、Bi がもつ大きなスピン軌道相互作用に起因して、ラシュバ型スピン分裂を伴う表面電子状態が数多く報告されている。Si(110)表面における先行研究では、Si(110)16×2 表面に 0.2 原子層 (ML)以下の Bi を蒸着するとSi(110)3×2-Bi 表面が 11 、さらに少ない Bi 量ではSi(110)3×4-Bi 表面が得られることが報告され、それぞれ 1/6 ML 及び 1/12 ML の構造モデルが提案されているが 21 、それらの電子状態は明らかにされていない。

そこで本研究では、これらの再構成表面の電子状態を角度分解光電子分光を用いて調べた。Fig. 1(a), (b)は、Si(110)3×2-Bi と 3×4-Bi 表面の Γ -X 方向のバンド分散で、双方ともにいくつかの表面状態が存在する。X 点から Γ 点にかけての結合エネルギー0.4 eV 付近の表面状態は 3×4 -Bi 表面にのみみられ、この状態の光電子強度は 3×2 -Bi 表面から徐々に Bi を脱離させるに従い増加することがわかった。

先行研究における構造モデルでは、3×2-Bi よりも 3×4-Bi の方に、基板 Si のダングリングボンドが多く含まれていることから、この表面状態は Si のダングリングボンドに由来すると考えられる。また、今回の結果は 3×2-Bi 表面には Si のダングリングボンドが存在しないことを示唆しており、構造モデルの再考が必要と考えられる。



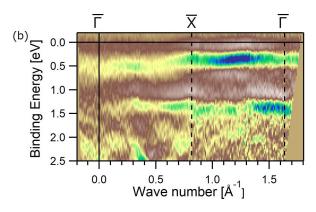


Fig. 1. Si(110)3×2-Bi(a)と 3×4-Bi(b)のバンド分散

文 献

- 1) H. Sakama et al., Jpn. J. Appl. Phys. 32, 2929 (1993).
- A.K.R. Ang et al., J. Vac. Sci. Technol. A34, 051401 (2016).

^{*}E-mail: nakatsuji.k.aa@m.titech.ac.jp

In/Si(111)表面上の金属フタロシアニン超薄膜の電子構造

○八田 振一郎, 松原 燦, 奥山 弘, 有賀 哲也

京都大学大学院理学研究科

Electronic structure of ultrathin metal phthalocyanine films on In/Si(111)

OShinichiro Hatta, Akira Matsubara, Hiroshi Okuyama and Tetsuya Aruga Graduate school of Science, Kyoto University

金属フタロシアニン(MPc)は芳香族性の平面状の有機分子であり、その固体は半導体的な性質をもつ。分子中心に内包される元素によって、単一分子でも結晶でも、多様な電気・磁気・光学的性質が発現することが知られている。また、真空蒸着による薄膜作製が容易であることから有機-金属界面のモデルケースとして電子構造の研究が盛んに行われてきた。界面の電子状態研究には、長距離秩序をもつ均一な MPc 薄膜が形成されることが望ましい。In/Si (111)表面は In (001)面によく似た原子レベルで平坦な表面原子配列をもち、表面状態によって金属的な物性を示す表面超構造を形成する。MPcはこの基板上で自己組織化により同一の単位格子をもつ単分子層を形成する 1)。本研究ではIn/Si (111)表面上に作製した 3d 遷移金属(M=Fe, Co, Ni, Cu)を内包した MPc 超薄膜の電子状態を、角度分解光電子分光法(ARPES)を用いて調べた。

In/Si (111)表面は、清浄 Si (111) 7×7 表面に In を蒸着後、約 300 $^{\circ}$ にに加熱することにより作製し、 $\sqrt{7} \times \sqrt{3}$ 超構造の形成を低速電子回折 (LEED) および ARPES により確認した。MPc は Ta 製のるつぼから蒸発させ、室温の In/Si (111)表面上に膜成長させた。単分子層の完成は LEED パターンおよび仕事関数の変化、また、In 4d の光電子強度の減衰から決定した。多層膜の膜厚は、単分子層完成までの蒸着時間から見積もった。ARPES 実験は京都大学および SAGA-LS 内佐賀大学ビームライン (BL13) で行った。放射光 (110 eV) を励起光とした測定は d 軌道由来の電子状態を同定する目的で、FePc、CoPc および CuPc について行った。測定はすべて室温で、蒸着と測定を交互に繰り返しながら電子状態の膜厚による変化を観測した。

価電子帯の測定結果から、今回測定した 4 つの MPc 薄膜は二つに分類されることが分かった。CuPc、NiPc はよく似た単分子層特有の電子構造を示した。配位子 HOMO(a_{1u})が東縛エネルギー1.7 eV に観測され、さらに深いエネルギーに、 b_{2s} 軌道由来と考えられる状態が CuPc と NiPc で確認された。これらの電子状態の PES 強度は多層膜の成長とともにピーク強度が単調に増加した。これに加えて単分子層では 1.0 eV を中心とした比較的幅の広い状態が観測された。似たような電子構造はアルカリ金属をドープした CuPc 薄膜について報告されているが $^{2)}$ 、HOMO や他の状態にシフトが見られなかったことから分子 LUMO への電荷移動ではないと考えられる。一方、FePc と CoPc では、 e_s 軌道の電子状態が単分子層において高エネルギー側へ 0.4-1.0 eV 程度シフトしていることが分かった。HOMO について同様の変化は観測されず、 e_s 軌道は中心金属の d_{xz} , d_{yz} 軌道を主成分とした面外に伸びる状態であることを考慮すると、観測されたシフトは表面状態との混成によると考えられる。中心金属と金属表面との直接的な結合は、push-back 効果(仕事関数の減少と関係づけられる吸着分子の作用)以外の変化を及ぼすことが予想される。実際、仕事関数は CuPc では減少した一方、FePc では増加するという、反対向きの変化が観測された。講演では、単分子膜の自己組織化および In/Si(111)表面の電気伝導への界面電子状態の影響についても考察する。

- 1) S. Yoshizawa et al: Nano Lett. 17, 2287 (2017).
- 3) T. Schwieger, H. Peisert, M. S. Golden, M. Knupfer, and J. Fink: Phys. Rev. B 66, 155207 (2002).

参考文献

^{*}E-mail: hatta@kuchem.kyoto-u.ac.jp

ツイスト角に依存したツイストグラフェン電子状態の ARPES による研究

飯盛 拓嗣 1 、今村 均 2 、Visikovskiy Anton 2 、魚谷 亮介 2 、梶原 隆司 2 、宮町 俊生 3 、服部 琢磨 1 、原沢 あゆみ 1 、矢治 光一郎 4 、中辻 寛 5 、北村 未歩 6 、堀場 弘司 6 、間瀬 一彦 6 、田中 悟 2 、 \bigcirc 小森 文夫 1*

¹東京大学物性研究所, ²九州大学工学研究院、³電気通信大学情報理工学研究科、⁴物質・材料研究機構 ⁵東京工業大学物質理工学院、⁶高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所

ARPES study of twist-angle dependent electronic states in twisted bilayer graphene

T. Iimori¹, H. Imamura², A. Visikovskiy², R. Uotani², T. Miyamachi³, T. Hattori¹, A. Harasawa¹, K. Yaji⁴, K. Nakatsuji⁵, M. Kitamura⁶, K. Horiba⁶, K. Mase⁶, T. Kajiwara², S. Tanaka², and \bigcirc F. Komori^{1*}

¹Institute for Solid State Physics, the University of Tokyo, ²Graduate School of Engineering, Kyushu University, ³Graduate School of Informatics and Engineering, the University of Electro-Communications, ⁴National Institute for Materials Science, ⁵School of Materials and Chemical Technology, Tokyo Institute of Technology, ⁶Institute of Materials Structure Science, High Energy Accelerator Research Organization

ツイスト 2 層グラフェン(TBG)は、相互に面内回転する 2 つのグラフェンシートを積み重ねたものであり、Bernal 積層の典型的な 2 層グラフェンで観察されるものとは異なる電子状態を示す。ツイスト角 θ が小さい場合、ディラック点の近くでのフェルミ速度は角度に強く依存し[1]、 θ ~1.1° [2]の魔法角で0となる。この魔法角では、大きな状態密度を持つフラットバンドが実現され、その電子的性質が注目されている。我々は、マクロ精密測定を可能とする大面積 TBG を作製する方法を開発し[3]、その電子状態を角度分解光電子分光(ARPES)によって調べた。

試料は、まず 4H-SiC (0001) 基板上に化学気相成長法により 3x3 バッファー層があり剥離が容易な単層グラフェンを成長させ、それら 2 枚を真空中で表面を清浄化した後に張り合わせたて作製した。このツイスト 2 層グラフェンは、ARPES 測定前に、光学顕微鏡、 μ -ラマン分光、低エネルギー電子回折(LEED)、 走査トンネル顕微鏡 (STM) で評価した。ARPES 測定では、SOR光(KEK-PF、BL13B、BL2A)を使用した。

4°回転 TBG の ARPES バンド像および STM 画像を図 1 に示す。STM 像では、表面のグラフェン格子とともに下層グラフェンとの格子回転に起因したモアレ模様がみられる。対応して、LEED では、周囲のサテライトスポットを含む2組の明るいグラフェンスポットがみられた。

ARPES 測定では、図1にある2つのグラフェン層由来のディラックバンドの他に、光電子強度の小さい複

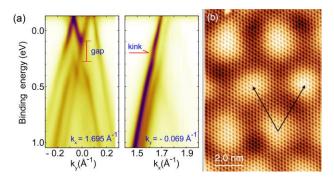


図 1 (a) 4° 回転 TBG o ARPES バンド像。左図が上下 2 層の K 点を含む面でのバンド断面、右図が上層の K 点を含み左図に垂直なバンド断面。 (b) STM 像。[3]

数のレプリカバンドが観察された。2層のグラフェンはpドープされており、下層の方が強くドープされている。バンド形状の2次元マッピングの解析により、 θ が減少するにつれてディラック速度が単層グラフェンに比べて、異方的に減少すること、および、複数の小さなバンドギャップの存在が分かった。これらのバンド構造は計算でも再現されており、数度ツイストグラフェンのバンド構造の詳細が明らかとなった。

文 献

- 1) J. M.B. Lopes dos Santos *et al.*, Phys. Rev. Lett. **99**, 256802 (2007).
- R. Bistritzer, and A.H. MacDonald, Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. 108, 12233 (2011).
- 3) H. Imamura *et al.*, Appl. Phys. Express **13**, 075004 (2020).

*E-mail: komori@issp.u-tokyo.ac.jp

SiC 上グラフェンへの Pb 挿入における電子状態の層数依存性

横井佑典¹, 辻川夕貴¹, ○高山あかり¹*

1早稲田大学先進理工学部

Electron state of Pb-intercalated graphene on SiC substrate with different number of sheets

Yusuke Yokoi¹, Yuki Tsujikawa¹ and ○Akari Takayama¹*

¹Department of Physics and Applied Physics, Waseda University

1. 背景と目的

グラフェンを用いたデバイス開発では、K 点におけるディラック型バンドのギャップ制御が課題となっている。SiC 基板上に成長したグラフェンは、基板からの電荷移動によりディラック点がフェルミ準位 (E_F) より高結合エネルギー側に位置しているが、Pb を蒸着することでバンド全体がホールドープされたように動くことが報告されている[1,2]。しかし、このバンド構造の変化の起源は、Pb によりバッファー層が終端されFree-standing な 2 層グラフェンが形成されるという見解と[1]、Pb とグラフェンの仕事関数の違いによりバンドシフトが起きたとする[2]異なる見解があり、Pb 蒸着によるバンド変化の起源の解決には至っていない。

本研究では、Pb インターカレートによるバンドの変化を明らかにするため、SiC(0001)上の0層(バッファー層) および1層、2層グラフェンについて、Pb 蒸着におけるバンド構造の変化の様子およびその起源を明らかにするため、角度分解光電子分光(ARPES)によりPb 蒸着量や蒸着後のアニール温度依存性を測定した。

2. 結果

ARPES 測定は SAGA-LS (BL-13) で行った。グラフェンは真空中で脱ガスし、バンド分散より層数を確認した後、室温で Pb を蒸着した。Fig. 1 に、1 層グラフェンへの Pb 蒸着後およびアニール後の K 点近傍のバンド分散を示す。Pb 蒸着後はバンドが E_F 方向へシフトし、ディラック点が E_F 近傍に位置していることがわかる。また、蒸着直後はバンド全体がブロードになるが、アニール温度を上昇させていくことでバンドがシャープになっていく様子が観測されたが、1 層グラフェンにおいては Pb 蒸着による層数の増加は観測されなかった。一方、0 層グラフェンに Pb を蒸着させる

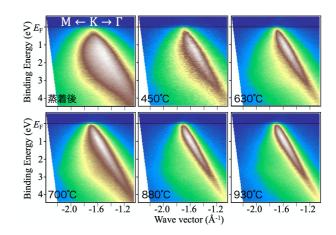


Fig. 1. Pb 蒸着 1 層グラフェンおよびアニール後の K 点近傍(M-K- Γ 方向)のバンド分散.

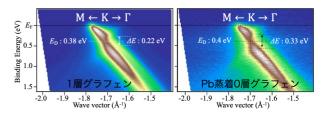


Fig. 2. 1 層グラフェンおよび Pb 蒸着 0 層グラフェン の K 点でのバンド分散.

と、1 層グラフェンに良く似たバンド分散を観測した (**Fig. 2**)。このディラックバンドのギャップサイズは 1 層グラフェンとは異なることから、Pb による電荷分布 の偏りがギャップサイズに影響を与えていることを示唆している。

講演では、詳細な実験結果を示すとともに、これら のバンド変化の起源について議論する。

文 献

- 1) A. Yurtsever, et al., Small, 12 (2016) 3956-3966.
- 2) Y. Tsujikawa, et al., AIP Advances, 10 (2020) 085314.

*E-mail: a.takayama@waseda.jp

UVSOR 光電子運動量顕微鏡による局所電子状態解析拠点の構築

〇松井 文彦 ^{1*}, 牧田 誠二 ¹, 松田 博之 ¹, 岡野泰彬 ¹, 矢野隆行 ¹, 中村 永研 ¹, 出田真一郎 ^{1,2}, 田中清尚 ^{1,2}, 長谷川 友里 ², 菅 滋正 ^{3,4}, 解良 聡 ^{1,2}

1分子科学研究所極端紫外光研究施設,2総合研究大学院大学,3大阪大学産業科学研究所,4ユーリッヒ研究所

UVSOR photoelectron momentum microscope: local electronic structure analysis station

○Fumihiko Matsui¹*, Seiji Makita¹, Hiroyuki Matsuda¹, Yasuaki Okano¹, Takayuki Yano¹, Eiken Nakamura¹, Shinichiro Ideta¹,², Kiyohisa Tanaka¹,², Yuri Hasegawa², Shigemasa Suga³,⁴, and Satoshi Kera¹,²

¹UVSOR synchrotron facility, Institute for Molecular Science, ²The Graduate University for Advanced Studies, ³The Institute of Scientific and Industrial Research, Osaka University, ⁴Forschungszentrum Jülich

光電子顕微鏡法および顕微分光法は微細構造の局所電子物性を解明するための重要なアプローチである。いわゆる光電子運動量顕微鏡(PMM)と軟 X線放射光源を組み合わせることにより、微視的な視野を持つ3次元運動量空間分解光電子分光法が実現される。PMMは、従来のARPES(E vs. k)タイプの半球型分析装置では困難であったμm サイズの結晶のフェルミ面の直接観察を容易にする。

UVSOR の軟 X線ビームライン BL6U に新しい PMM ステーションを建設した 1 。この PMM は、光電子顕微鏡(PEEM)レンズ、投影型エネルギーフィルター (静電半球電子分析器)、および CMOS カメラを備えた 2D 検出器で構成されている(Fig.1)。試料ステージは、ヘキサポッドによって正確に制御され、測定時の試料温度は 8 K から 400 K の間で設定できる。エネルギー分解能は 20 meV、顕微鏡モードでの空間分解能は 50 nm、また運動量分解能は 0.012 Å $^{-1}$ e 達成した。視野径は $2 \mu m$ まで絞ることができる。試料と $2 \mu m$ まで絞ることができる。試料と $2 \mu m$ を建成した。

Screen exit slit
microscopic image /
momentum distribution

CMOS camera

contrast aperture
momentum space
intensity distribution

real space microscopic image

Fig. 1. 光電子運動量顕微鏡の模式図 ¹⁾。

*E-mail: matui@ims.ac.jp

の間には高電圧が印加されるため、試料が平坦である ことが重要である。超高真空状態でサブ mm サイズの 結晶をきれいに劈開する技術を開発した。

Fig. 2 は、直径 6 Å-1 の広い波数範囲での価電子帯測定結果を示している。試料を動かさずに広い波数空間のデータを表示することができ、試料方位の調整が容易である。実・逆空間の視野を拡大することができ、例えば Dirac cone の運動量顕微分析が容易である。相転移での Fermi 面挙動の観察、光電子分子軌道トモグラフィー、共鳴光電子回折を通じた軌道選択励起法などの開発・展開を進めている。

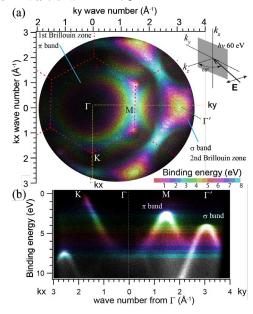


Fig. 2. グラファイト劈開表面の(a)光電子角度分布と(b) バンド分散。等結合エネルギーごとに色分けし3次元情報を表現した。

文 献

1) F. Matsui, et al. Jpn. J. Appl. Phys. 59 067001 (2020).

表面科学(SS1)物性

[2Bp] 表面科学(SS1)物性

座長:松田 巌・荒船 竜一

Fri. Nov 20, 2020 1:00 PM - 3:30 PM B会場

[2Bp01] Measuring the conduction band of Ta₂NiSe₅ using low energy inverse photoelectron spectroscopy

○川村啓太¹⁾, 佐藤晴輝¹⁾, 折尾響¹⁾, 杉本高大²⁾, 太田幸則³⁾, 大槻太毅⁴⁾, 吉田鉄平⁴⁾, 丸岡うらら⁵⁾, 中埜彰俊⁵⁾, 寺崎一郎⁵⁾, 吉田弘幸^{6,7)} (¹⁾千葉大院融合理工, ²⁾慶應大理工, ³⁾千葉大院理, ⁴⁾京大院人間・環境, ⁵⁾名大院理, ⁶⁾千葉大院工, ⁷⁾千葉大学分子キラリティ研究センター) 1:00 PM - 1:15 PM

[2Bp02S] Conduction band structures of HOPG studied by angle-resolved low energy inverse photoelectron spectroscopy

〇折尾響¹⁾,佐藤晴輝¹⁾,Abd Rahman Syed A.¹⁾,川村啓太¹⁾,吉田弘幸^{2,3)} (¹⁾千葉大院融合理工,²⁾ 千葉大院工,³⁾千葉大分子キラリティ研究センター)

1:15 PM - 1:30 PM

[2Bp03S] Enhancement of signal intensity for inverse photoelectron spectroscopy of organic semiconductor measurement by grating-coupled surface plasmon resonance

〇柴田幸輝 1),千田雛子 2),田和圭子 2),吉田弘幸 3,4)(1 1千葉大院融合理工, 2 1関西学院大理工, 3 1千葉大院工, 4 1千葉大分子キラリティー研究センター)

1:30 PM - 1:45 PM

1:45 PM - 2:00 PM

[2Bp04] Hybridization vs decoupling: Influence of an h-BN interlayer on the physical properties of a lander-type molecule on Ni(111)
○相原巧実¹⁾, Maximilian Schaal²⁾, Felix Otto²⁾, Marco Grünewald²⁾, Torsten Fritz²⁾, 吉田弘幸 ^{3,4)} (¹⁾千葉大院融合理工, ²⁾イェーナ大学, ³⁾千葉大分子キラリティセンター, ⁴⁾千葉大院工)

[2Bp05] Measurement of energy band structure of the lowest unoccupied molecular orbital of organic semiconductor

○佐藤晴輝¹⁾,折尾響¹⁾,石井宏幸²⁾,吉田弘幸^{3,4)}(¹⁾千葉大院融合理工,²⁾筑波大数理物質,³⁾千葉

大院工, ⁴⁾千葉大分子キラリティ研究センター)

2:00 PM - 2:15 PM

[2Bp07] Relationship between the resistance enhancement and H concentration in NdNiO₃ thin film

〇西谷侑将 1 , 小澤孝拓 1 , Sidik Umar 2 , 服部梓 2 , 田中秀和 2 , 福谷克之 1,3 (1 東大生研, 2 阪大産研, 3 原子力機構先端研)

2:30 PM - 2:45 PM

[2Bp08] Interpretation of correlation between nano-scale real contact and friction based on stacking structure

〇平尾佳那絵¹⁾,岡本遼路¹⁾,大向秀弥¹⁾,佐々木成朗¹⁾(¹⁾電通大院情報理工) 2:45 PM - 3:00 PM

[2Bp09S] Amonton-Coulomb's Law of The Interface of Multi-Layered C_{60} Bearing System

〇梶皓彦 1 , 岡本遼路 1 , 渡邉章嗣 1 , 三浦浩治 2 , 鈴木勝 1 , 佐々木成朗 1 (1 電通大院情報理工, 2 愛知教育大物理)

3:00 PM - 3:15 PM

低エネルギー逆光電子分光による Ta2NiSe5 の伝導帯の直接観測

○川村啓太¹, 佐藤晴輝¹, 折尾響¹, 杉本高大², 太田幸則³, 大槻太毅⁴, 吉田鉄平⁴, 丸岡うらら⁵, 中埜彰俊⁵, 寺崎一郎⁵, 吉田弘幸^{6,7*}

1千葉大学大学院融合理工学府,2慶應義塾大学理工学部,3千葉大学大学院理学研究院,

4京都大学大学院人間・環境学研究科, 5名古屋大学大学院理学研究科,

6千葉大学大学院工学研究院,7千葉大学分子キラリティ研究センター

Measuring the conduction band of Ta₂NiSe₅ using low energy inverse photoelectron spectroscopy

OK. Kawamura¹, H. Sato¹, H. Orio¹, K. Sugimoto², Y. Ohta³, D. Ootsuki⁴, T. Yoshida⁴,

U. Maruoka⁵, A. Nakano⁵, I. Terasaki⁵ and H. Yoshida^{6,7*}

¹Graduate School of Science and Engineering, Chiba University, ²Faculty of Science and Technology, Keio University, ³Graduate School of Science, Chiba University, ⁴Graduate School of Human and Environmental Studies, Kyoto University,

⁵ Graduate School of Science, Nagoya University, ⁶ Graduate School of Engineering, Chiba University

⁷Molecular Chirality Research Center, Chiba University

バンドギャップが小さい半導体やバンドの重なりが小さい半金属において、励起子が量子凝縮することで励起子絶縁体という状態が発現する[1]。 Ta_2NiSe_5 はその候補であり、通常相では半導体的なバンドをもち、励起子のBose-Einstein 凝集(BEC)によってギャップが開くことが期待される。すでに価電子帯上端が低温で低エネルギーシフトすることが報告されており[2]、伝導帯の観測が切望されている。

本研究では、高精度で伝導帯測定が可能な低エネルギー逆光電子分光法 (LEIPS) [3]を用いて $300\,\mathrm{K}$ と $80\,\mathrm{K}$ で伝導帯の Γ 点周辺を直接観測した。LEIPS では低エネルギー電子を試料に照射し、その電子が伝導帯に緩和する際に放出される光を検出する。本研究では、光の検出エネルギー $6.43\,\mathrm{eV}$ 、エネルギー分解能 $0.6\,\mathrm{eV}$ で測定した。

観測したスペクトルを図 1 に示す。フェルミ準位から 0.55 eV にピーク、2.0 eV 付近に幅のある構造が観測された。 0.55 eV に観測されたピークは、理論計算によると二つのバンドからなり、低温で BEC により高エネルギー側のバンドがシフトすることが予想される。しかし 300 K から 80 K に冷却してもピークの幅とエネルギーはほとんど変化せず、解析の結果、エネルギーの変化の上限は $10\,\mathrm{meV}$ と見積もられた。この結果は、 $\mathrm{Ta_2NiSe_5}$ の通常相が強い電子-正孔間相互作用によってギャップが開いた状態であるという描像[4]と整合する。

文 献

- [1] D. Jérome et al., Phys. Rev. 158, 462 (1967)
- [2] K. Seki et al., Phys. Rev. B 90, 155116 (2014)
- [3] H. Yoshida, Chem. Phys. Lett. 539-540, 180 (2012)
- [4] K. Sugimoto et al., Phys. Rev. Lett. 120, 247602 (2018)

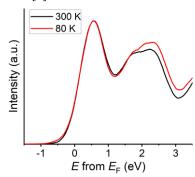


図 1: Ta₂NiSe₅ 伝導帯の LEIPS スペクトル

^{*}E-mail: hyoshida@chiba-u.jp

角度分解低エネルギー逆光電子分光法による HOPG の伝導帯バンド構造の実測

○折尾 響¹, 佐藤晴輝¹, Syed A. Abd Rahman¹, 川村啓太¹, 吉田弘幸^{2,3*}

¹千葉大学大学院融合理工学府, ²千葉大学大学院工学研究院, ³千葉大学分子キラリティ研究センター

Conduction band structures of HOPG studied by angle-resolved low-energy inverse photoelectron spectroscopy

OHibiki Orio¹, Haruki Sato¹, Syed A. Abd Rahman¹, Keita Kawamura¹, Hiroyuki Yoshida^{2,3}

¹Graduate School of Science and Engineering, Chiba University, ²Graduate School of Engineering, Chiba University, ³Molecular Chirality Research Center, Chiba University

グラファイトは代表的な2次元層状物質であり、その伝導帯のバンド構造は、電子伝導機構と直接かかわることから重要である。この伝導帯は、角度分解逆光電子分光法(ARIPES)により直接観測することができる。1990年代までにいくつかのグループによりARIPES測定が行われてきたが測定精度が低かったり。一方、密度汎関数理論(DFT)によるバンド計算は、バンド構造の重要な研究手段である。しかし、真空準位より高エネルギーの伝導帯では、電子は自由電子的な挙動をするため正確な計算が難しい。このようなことから、ARIPESによる実験とDFTによるバンド計算の結果は一致せず、伝導帯の電子構造は未解明である。

我々は、低エネルギー電子を試料に照射して近紫外光を観測する低エネルギー逆光電子分光法(LEIPS)を開発してきた²⁾。最近、この技術を発展させ伝導帯バンドを実測する角度分解 LEIPS(ARLEIPS)の開発に成功した³⁾。本研究では、高配向熱分解グラファイト(HOPG)の伝導帯を ARLEIPS により精査した。

HOPG は、グラファイトが方位角方向にランダムに一軸配向した多結晶である。そのためバンド計算との直接比較は困難とされてきた。近年、"角度の状態密度"を考慮し、多結晶の角度分解紫外光電子分光スペクトルとバンド計算の比較が行われている 4。我々はこの手法を伝導帯にも適用し、バンド計算の結果から多結晶試料で観測されるバンド構造を再現した。

まず、鏡像準位のスペクトルを先行研究 りと比較した。分解能の向上により、本研究では ARIPES で観測されなかった主量子数 2 の鏡像準位が観測された。

Fig.1 に本研究と ARIPES から求めたバンド構造 11 を示す。従来の ARIPES にはない 11 eV と 13 eV を通るバンドが観測された。一方、ARIPES で観測さ

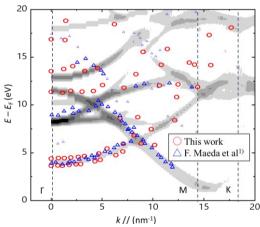


Fig.1 Band dispersion of HOPG

れた 8 eV 付近のバンドは観測されなかった。これは、 検出光エネルギーが ARIPES(9.5 eV) と ARLEIPS (4.82 eV)であるため、選択律により異なるバンドが観測されたと考えられる。

DFT によるバンド計算に基づくシミュレーション 結果を Fig.1 にグレースケールで示す。ARIPES、 ARLEIPS 両方の伝導帯バンドが計算結果とよく一致 した。よって、DFT によるバンド計算の結果は正しく、 光エネルギーによって遷移確率が異なる ARLEIPS と ARIPES は相補的であると考えられる。本研究は、 ARLEIPSが2次元層状物質の伝導帯研究に有効である ことを示している。

文 献

- 1) F. Maeda et al, Phys. Rev. B. 37 (1988) 4482.
- 2) H. Yoshida, Chem. Phys. Lett. 539-540 (2012) 180.
- 3) 出田ら, 第 65 回応用物理学会春季学術講演会, G202-12, 東京 (2018)
- 4) S. Y. Zhou et al, Phys. Rev. B 71 (2005) 161403

回折格子結合型表面プラズモン共鳴を用いた 有機半導体の逆光電子分光信号強度の増強

○柴田 幸輝¹, 千田 雛子², 田和 圭子², 吉田 弘幸^{3,4*}

1千葉大学大学院融合理工学府、2関西学院大学理工学部、3千葉大学大学院工学研究院、4千葉大学分子キラリティー 研究センター

Enhancement of signal intensity for inverse photoelectron spectroscopy of organic semiconductor measurement by grating-coupled surface plasmon resonance

OKoki Shibata¹, Hinako Chida², Keiko Tawa², Hiroyuki Yoshida^{3, 4*}

¹Graduate School of Science and Engineering, Chiba University, ²School of Science and Technology, Kwansei Gakuin University, ³Graduate School of Engineering, Chiba University, ⁴Molecular Chirality Research Center, Chiba University,

逆光電子分光法(IPES)は、光電子分光の逆過程とみ なすことのできる非占有準位を調べる有力な実験手法 である。しかし、信号強度が光電子分光法の 10^{-5} しか ない。我々は、低エネルギー逆光電子分光法(LEIPS)[1] の測定波長が金属の表面プラズモン共鳴(SPR)波長と 一致することを利用して、IPES 信号強度の増強を試み てきた。これまでに銀ナノ粒子の局在 SPR による 400 nm 付近の信号増強に成功した[2]。

本研究では、SPR 波長が理論的に予測しやすい回折 格子結合型表面プラズモン共鳴(GCSPR)に注目した。 これをナノ粒子作製が困難な Al に適用し、LEIPS の常 用波長である 200 nm~300 nm での信号強度の増強を 試みた。まず、Al からの信号強度を確認した後、代表 的な有機半導体である銅フタロシアニン(CuPc)からの LEIPS 信号の増強を試みた。

GCSPR 媒体には、間隔 500 nm の回折格子に Al を 成膜して用いた(Al chip)[3]。LEIPS 測定では、Fig. 1a に 示すように、電子線を試料表面に対して垂直に入射し、 角度 θ =55° で光を検出した。強度の基準には、回折格 子のない Al 薄膜からの信号を用いた。

まず、Al chip について LEIPS 測定を行ったところ、 信号強度の増強が観測され、増強度は検出波長に依存 した(Fig. 1b)。 増強度は検出波長 285 nm において最大 の 2.3 倍となった。この回折格子に膜厚 5.0 nm の CuPc を真空蒸着したところ、CuPc の信号強度が 285 nm で 1.6 倍になった。増強度は測定波長に敏感に依存した。

ピッチ Λ の回折格子を用いた GCSPR では、角度hetaで 検出する波数 \mathbf{k}_{ph} の検出光を格子ベクトル \mathbf{k}_{g} (=2 π/Λ) の整数(m)倍シフトさせて

$\mathbf{k}_{\rm sp} = \mathbf{k}_{\rm ph} \sin\theta + m\mathbf{k}_{\rm g} (1)$

とすることで、表面プラズモンの波数 $k_{\rm sp}$ と一致させ、 SPR を発生させる。式(1)からは、SPR 波長は 180 nm、 460 nm と予測される。Fig. 1b の増強ピークとおおむね 一致した。このことから信号増強が GCSPR によるも のだと考えられる。なお、250 nm 以下の短波長では、 増強度が低下しているが理由はわからない。

次に、CuPc の膜厚を増やしながら LEIPS 測定を行 なったところ、膜厚増加とともに増強度が指数関数的 に減衰した。これは、SPR の電場増強効果が Al 表面か ら数 nm 程度までしか届かないためである。このこと から、Fig. 1b の各膜厚での増強ピークの値より、SPR 侵入長を 6.0 nm と求めた。講演では、Al チップの向き を90°回転させた結果も合わせて議論する。

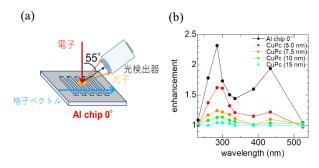


Fig. 1. (a) LEIPS 測定の概要図。(b) IPES 信号強度 増強度。

- 1) H. Yoshida, Chem. Phys. Lett. 180-181, 539 (2012).
- 2) R. Usui, H. Yoshida, J. Phys. Chem. C, 123, 28789
- 3) T. Kadoyama, et al, Langmuir 34, 4217 (2018).

二次元層状物質 h-BN の挿入による Ni(111)と DBP の相互作用の変化

○相原 巧実¹, Maximilian Schaal², Felix Otto², Marco Grünewald², Torsten Fritz², 吉田 弘幸 ^{3,4*}

「千葉大学大学院融合理工学府, ²イェーナ大学, ³千葉大学分子キラリティセンター, ⁴千葉大学大学院工学研究院,

Hybridization vs decoupling: influence of an h-BN interlayer on the physical properties of a lander-type molecule on Ni(111)

OTakumi Aihara¹, Maximilian Schaal², Felix Otto², Marco Grünewald², Torsten Fritz², Hiroyuki Yoshida^{3,4*}

¹Graduate School of Science and Engineering, Chiba University, ²Institute of Solid State Physics, Friedrich Schiller University Jena, ³Molecular Chirality Research Center, Chiba University, ⁴Graduate School of Engineering, Chiba University,

h-BNのような2次元層状物質は有機分子と金属表面を電子的に分離する[1]。このことから、有機半導体デバイスの金属電極の表面装飾への応用が期待される。しかし、2次元層状物質を挿入すると2次元層状物質上の有機分子の電子状態や成長モードも変化することから[2]、電子構造と薄膜構造についての詳細な知見が不可欠である。本研究では、Ni(111)表面とその上に吸着した有機分子 tetraphenyldibenzoperiflanthene (DBP)について、h-BNの挿入による電子状態、薄膜構造の変化を精査した[3]。

h-BN は Ni(111)上に化学気相成長法(CVD 法)により成長させた。Ni(111)、h-BN/Ni(111)上に蒸着された DBP の挙動は、differential reflectance spectroscopy (DRS)[4]で確認し、蒸着膜の特性を紫外光電子分光法(UPS)、極低温走査トンネル顕微鏡(LT-STM)、X 線光電子分光法(XPS)、低速電子線回折(LEED)を用いて調べた。

Fig. 1にDBPを蒸着しながら測定したDRSの結果を示す。DRS は有機分子を蒸着しながらの in-situ で反射率変化を観測する手法である。分子と基板の相互作用の程度や分子の成長モードを推測することができる。膜成長初期では、Ni(111)上の DBP のスペクトルはh-BN/Ni(111)上の DBP に比べてピークの幅が広いということが分かる。これは、DBP と Ni(111)の間の強い電子的相互作用によるものだと考えられる。またLEED には分子由来の回折は観測されなかった。これは、金属表面との強い相互作用で分子が動けないためと考えられる。一方、h-BN/Ni(111)上の DBP のスペクトルは不活性雲母上の DBP の結果[5]と良く一致することから、h-BN の挿入により、DBP と Ni(111)の電子的相互作用が減少したと考えられる。LEED の測定結

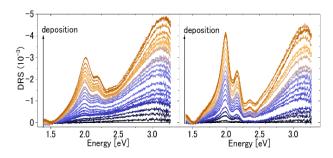


Fig. 1. Results of DRS, (left) DBP on Ni(111), (right) DBP on h-BN/Ni(111)

果から h-BN 上で分子はエピタキシャル成長し、STM からはヘリングボーン構造を取ることが分かった。 UPS からは、h-BN の挿入で Ni(111)表面と DBP の電子状態が分離できることが確認された。さらに、UPS の結果から h-BN/Ni(111)上の DBP の仕事関数(WF)は 3.45 eV まで低下することが分かった。低 WF 材料は半導体層に効率よく電子注入するために必要である[6]。しかし、低 WF 金属は反応性が高いため、有機分子と強く相互作用する[5]。今回の結果から h-BN を挿入することで、分子が金属表面から電子的に分離できることが分かった。そのため、この系が分子エレクトロニクスのための有望な n 型電極になることが考えられる。

文 献

- [1] W. Auwärter, Surf. Sci. Rep. 74, 1-95 (2019)
- [2] T. Tian et al., Ind. Eng. Chem. Res. **56**, 10552 (2017)
- [3] M. Schaal et al., *Beilistein J. Nanotechnol.* **11**, 1168 (2020)
- [4] R. Forker et al., Annu. Rep. Prog. Chem. Sect. C: Rhys. Chem., 108, 34 (2012)
- [5] F. Otto et al., J. Phys. Chem. C 124, 4114-4127 (2020)
- [6] J. T. E. Quinn et al., J. Mater. Chem. C 5, 8654 (2017)

有機半導体の空準位エネルギーバンド構造測定

○佐藤 晴輝¹, 折尾 響¹, 石井宏幸², 吉田弘幸^{3,4*}

¹千葉大学大学院融合理工学府, ²筑波大学数理物質系, ³千葉大学大学院工学研究院, ⁴千葉大学分子キラリティ研究センター

Measurement of energy band structure of the lowest unoccupied molecular orbital of organic semiconductor

OHaruki Sato¹, Hibiki Orio², Hiroyuki Ishii², Hiroyuki Yoshida^{3,4*}

¹Graduate School of Science and Engineering, Chiba University,

²Department of Applied Physics, Faculty of Pure and Applied Sciences, University of Tsukuba

³Graduate school of Engineering, Chiba University

⁴Molecular Chirality Research Center, Chiba University

エネルギーバンド構造(以下バンド構造)は、物性の基本的な情報である。有機半導体では、バンド構造は分子間の軌道の重なりにより形成される。中でも最高占有軌道(HOMO)と最低非占有軌道(LUMO)のバンド構造は電荷輸送と密接に関わるため重要である。HOMO バンド構造は、1990 年代から測定されてきており、有効質量や移動積分、電荷・フォノン結合定数などの電荷輸送を議論する上で不可欠な情報を提供してきた1)。一方、LUMO バンド構造の測定はこれまで実現していない。

我々は、有機分子の損傷閾値以下のエネルギーの電子線を用いて、空準位を測定する低エネルギー逆光電子分光法(LEIPS)を開発し²⁾、有機半導体の非破壊測定を進めてきた。さらに、LEIPS を発展させて LUMO バンド 構造の測定を可能にする角度分解 LEIPS (ARLEIPS)の開発にも成功した³⁾。

本研究では、ARLEIPS を用いて、初めての有機半導体の LUMO バンド構造の測定を目指した。試料には、代表的な有機薄膜トランジスタの活性層として用いられており、大きなバンド幅が期待されることから、ペンタセンの薄膜相を選択した。なお、ARLEIPS は、検出光エネルギー 4.82 eV、装置のエネルギー分解能 0.37 eV、電子線の発散角 6°の条件で、室温で測定した。

ARLEIPS 測定から得たバンド構造を Fig.1 に示す(赤丸)。試料であるペンタセン薄膜は、 c^* 軸が基板垂直方向に一軸配向した多結晶である 4 。一軸配向した層状物質の角度分解光電子分光では、対称性の高い点からの信号が強調されることが示されている 5 。ペンタセン薄膜相のバンド構造も 2 次元的であるため、多結晶試料でありながら明確なバンド構造が観測されたと考

えられる。

ペンタセンのバンド構造は強束縛近似によってよく 再現される。。そこで強束縛近似に基づき、多結晶の バンド構造をシミュレートした。最もよく実験結果を 再現した結果を Fig.1 にヒートマップで示す。ここか ら、移動積分を計算したところ、密度汎関数理論(DFT) により求めた値。よりも小さいことが分かった。この 実験事実は、これまで理論により否定されてきたポー ラロンが形成されていることを示す。

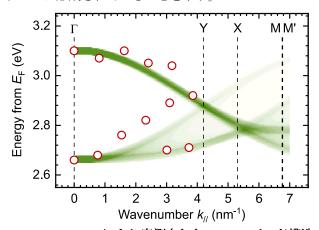


Fig. 1 ARLEIPS により実測された LUMO バンド構造 (赤丸)、2 次元強束縛近似モデルに基づいてシミュレートした多結晶バンド(ヒートマップ)

文 献

- 1) Y. Nakayama et al., J. Mater. Chem. C 8, 9090 (2020).
- 2) H. Yoshida, Chem. Phys. Lett. 539-540, 180 (2012).
- 3) 出田、樫本、佐藤、吉田, 第65回応用物理学会春季 学術講演会, G202-12 (2018).
- 4) H. Yoshida et al., Appl. Phys. Lett. 90, 181930 (2007).
- 5) S. Park et al., Commun. Phys. 2, 1 (2019).
- 6) H. Yoshida et al., Phys. Rev. B 77, 235205 (2008).

NdNiO3 薄膜における電気抵抗上昇の結晶中水素濃度依存性

○西谷 侑将 ^{1*}, 小澤 孝拓 ¹, Umar Sidik², 服部 梓 ², 田中 秀和 ², 福谷 克之 ^{1,3}
¹東京大学生産技術研究所, ²大阪大学産業科学研究所

Relationship between the resistance enhancement and H concentration in NdNiO₃ thin film

○Yusuke Nishiya¹, Takahiro Ozawa¹, Umar Sidik², Azusa N. Hattori², Hidekazu Tanaka², Katsuyuki Fukutani¹

¹ Institute of Industrial Science, The University of Tokyo, ² The Institute of Scientific and Industrial Research, Osaka University ³ ASRC, Japan Atomic Energy Agency

ペロブスカイト型ニッケル酸化物では、温度変化により金属絶縁体転移を起こすことがしられている.近年、結晶へ水素原子を導入することにより、新たな絶縁相が発現することが報告され興味が持たれている[1].しかしながら、結晶中水素濃度の定量的な測定データが不足しているため、抵抗上昇の起源や水素濃度と関係は明らかになっていない.我々は、水素濃度と電気抵抗・電子状態の相関を明らかにすべく研究を行っている.本研究では NdNiO3 薄膜試料に対し、共鳴核反応法(NRA)を用いた結晶中水素濃度の定量測定と、電気抵抗測定を行った.

試料は SrTiO3 基板上にパルスレーザー堆積法(PLD) により NdNiO3薄膜(120nm)を成長させたものを用いた. 最上部には Pt(10nm)を島状に堆積させており、水素曝 露を行うことで Pt を介して水素原子を NdNiO3 結晶中 に導入できる. Fig.1 が各水素化段階における NRA 測 定による結晶中水素濃度の深さ分布である. 水素化に 伴い水素濃度が増大し、特に深さ 100nm の界面近傍で 水素濃度が高くなる様子が観測された. Fig.2 が 20~ 80nm 領域における平均水素濃度と抵抗値の関係であ る. 水素濃度が x = 0.4 程度に相当する点で急峻に抵抗 が上昇する結果が得られた.一方で、水素化による抵 抗上昇が飽和した後真空下加熱したところ, 水素濃度 はわずかに減少しているにも関わらず抵抗は室温で 1.5 倍程度上昇しており, 結晶格子の乱れ等, 水素濃度 以外の要因も NdNiO3 における抵抗上昇に寄与してい る可能性が示唆された.

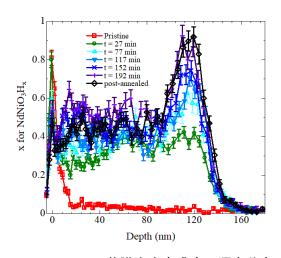


Fig.1. NdNiO3 薄膜中水素濃度の深さ分布

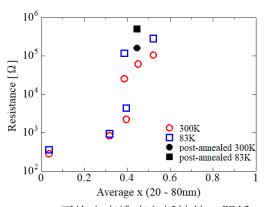


Fig.2. 平均水素濃度と抵抗値の関係

文 献

[1] J. Shi et al., Nat. Commun. 5, 4860 (2014).

*E-mail: nishiya@iis.u-tokyo.ac.jp

ナノスケール真実接触と摩擦との相関の積層構造による解釈

○平尾 佳那絵¹, 岡本 遼路¹, 大向 秀弥¹, 佐々木 成朗¹*

1電気通信大学大学院 基盤理工学専攻

Interpretation of correlation between nano-scale real contact and friction based on stacking structure

OKanae Hirao¹, Ryoji Okamoto¹, Shuya Ohmuki¹ and Naruo Sasaki^{1*}

¹The University of Electro-Communications

1. はじめに

グラフェンを用いた超潤滑に関する先行研究として Dienwiebel らは、摩擦顕微鏡を用いて平均摩擦力の異方性を観測しており[1]、同様な研究は理論研究からも報告されている[2]。ナノスケール摩擦の異方性はこれまで積層界面の整合性にもとづいて解釈されてきたが、本研究では整合性を真実接触の概念で再解釈する。まず研究の第一歩として、グラフェンシートの滑り過程における水平力とナノスケール接触との相関を、積層構造の周期性を反映するモアレパターンの数理にもとづいて議論した。

2. 計算方法/計算モデル

本研究では、計算モデルとしてグラファイト基板上にグラフェンシートを安定に吸着させた系を用いた。初期状態としてグラフェンシート/グラファイト基板間の配向角度を $\theta_{\rm in}=0$ deg.(AB 積層)で配置し (Fig. 1 参照),グラフェンシートを回転 (0 deg. \leq $\theta_{\rm in} \leq 10$ deg.) させてから並進ベクトルdだけ滑らせて生じる相互作用ポテンシャルエネルギーとグラフェンシートにかかる力を基板の格子周期を反映する Steele 力場[3]を用いて解析的に計算した.

3. 結果および考察

グラフェンシート/グラファイト基板界面の接触 効果を調べる為に、グラフェンシートの各原子に働く垂直力 f_z の値にしたがって、シートを構成する各原子を色分けした。その結果、 AB 積層構造および AA 積層構造の分布がモアレパターンの周期で現れることが分かった。

さらに, スライド過程においてグラフェンシート全

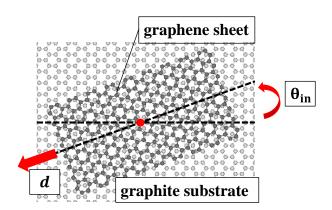


Fig. 1. 計算モデル

体に働く水平力曲線を計算すると $\theta_{in} > 0$ deg.で積層構造の分布周期に対応する包絡線が現れた。また水平力曲線の最大値は先行研究[1,2]と同様の異方性を示し、 θ_{in} の増加に伴う減少傾向を見せた。

4. 結論

本研究では各原子に働く垂直力 f_z の二次元分布が形成するモアレパターンが局所的な AB 積層構造および AA 積層構造に対応することに着目し、グラフェンシートに働く水平力とナノスケール接触との相関を明らかにした。

文献

- M. Dienwiebel et al., Phys. Rev. Lett. 92, 126101 (2004).
- N. Sasaki, T. Ando, and K. Miura et al., e-J. Surf. Sci. Nanotech. 14, 204 (2016).
- 3) W.A.Steele, Surf. Sci. 36, 317 (1973).

^{*}E-mail: naruo.sasaki@uec.ac.jp

多層系 Cm 分子ベアリング界面のアモントン-クーロン則

○梶 皓彦¹, 岡本 遼路¹, 渡邉 章嗣¹, 三浦 浩治², 鈴木 勝¹, 佐々木 成朗¹* 1電気通信大学大学院 情報理工学研究科, 2愛知教育大学物理領域

Amonton-Coulomb's Law of The Interface of Multi-Layered C60 Bearing System

OAkihiko Kaji¹, Ryoji Okamoto¹, Akitsugu Watanabe¹, Kouji Miura², Masaru Suzuki¹, and Naruo Sasaki^{1*} ¹The University of Electro-Communications, ²Aichi University of Education

1. はじめに

近年、ナノ・マイクロマシンの開発に関する研究は 著しい発展を遂げているが、微小空間では摩擦や凝着 の影響が増大することから、ナノ・マイクロマシンが 十分に動作しないという問題を抱えている。我々の研 究グループで開発された C_{ω} 分子ベアリングは、実験 とシミュレーションの両面で超潤滑特性を持つことが 示されており、この問題を解決する潤滑剤としての応 用が期待されている(1-3)。先行研究では、グラフェン /C₆₀/グラフェンモデルを用いた分子力学シミュレー ションにより、グラフェン/C60 界面摩擦の素過程に関 する議論が行われた(4)。しかし、実際の系はグラフェ ンと C60 分子が多層構造を形成しており、先行研究で は考慮されていない複数のスライド界面を有すること やグラフェンの変形による効果を考える必要がある。 本研究では、Cm分子の上下に1層ずつグラフェン層を 加えたモデルにより、多数のスライド界面及びグラ フェンの変形が摩擦特性に与える効果を調べた(図1)。

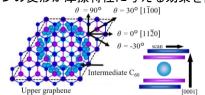


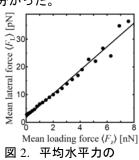
図 1. 多層系 C₆₀ 分子ベアリングモデル

2. 計算手法

平均荷重 $\langle F_z \rangle = 4.8 \times 10^{-3} \sim 7.6 \text{ nN }$ の範囲におけるそ れぞれの準安定構造に対して上層グラフェンを[1010] 方向に 5.3 nm 水平走査させ、水平力の平均値〈 F_L 〉を 求めた。共有結合相互作用は Tersoff potential、非共有 結合相互作用は Lennard-Jones potential で表し、系の全 エネルギーを共役勾配法 (CG 法) により最小化する ことでエネルギー的に準安定な状態を計算した。

3. 結果及び考察

本系における〈FL〉の荷重依存性には、先行研究で 用いた単層モデルの計算結果に現れた〈 F_z 〉 \geq 4 nN での非線形性が見られず、線形性が保たれた(図 2)。 その要因を調べるため内部グラフェンの変形に着目す ると、内部グラフェンには C60 分子の重心上を最大値 としたたわみが生じており、その大きさと範囲は荷重 に伴って増加することが分かった。さらに、走査時の 各界面での滑り量の比較から、内部グラフェンのたわ みは界面の滑りやすさに影響することが分かった。た わみの小さい低荷重下ではその影響は小さく、内部グ ラフェンのほぼ全体が外部グラフェンと面接触状態に あるとみなせることから、グラフェン/グラフェン界面 が滑りにくくなる(図3上)。一方、たわみの大きい高 荷重下では、その凹凸により面接触が崩れ、固着領域 が減少するため低荷重下に比べグラフェン/グラフェ ン界面が滑りやすくなる(図3下)。このように、内部 グラフェンのたわみによって新たに滑りやすい界面を 生んだことが〈FL〉の非線形増加を抑えていることが 分かった。



荷重依存性

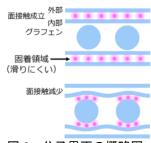


図 3. 分子界面の概略図 上: 低荷重 下: 高荷重

納言

本研究では(グラフェン)2/C60/(グラフェン)2 モデルの 摩擦特性について、グラフェンの変形と界面の滑り特 性に着目した議論から、内部グラフェンの変形及び複 数のスライド界面がアモントン-クーロン則の成立に 寄与することを明らかにした。

文

- 1) K. Miura, S. Kamiya, and N. Sasaki, Phys. Rev. Lett. 90, 055509 (2003).
- 2) K. Miura, D. Tsuda and N. Sasaki, e-j. Surf. Sci. Nanotech. 3, 21 (2005).
- 3) K. Miura, D. Tsuda, N. Itamura and N. Sasaki, Jpn. J. Appl. Phys. 46, 49 (2007).
- 4) N. Sasaki et al., Tribology Online 7, 96 (2012).

*E-mail: k1933030@edu.cc.uec.ac.jp