

ダイヤモンド表面と溶融アルカリ金属の相互作用

○島田敏宏^{1*}, 竹鼻大貴¹, 山根伊知郎¹, 長浜太郎¹¹北海道大学大学院工学研究院・総合化学院

Interaction between Diamond Surface and Molten Alkali Metals

○Toshihiro Shimada¹, Hiroki Takehana¹, Ichiro Yamane¹, Taro Nagahama¹¹Faculty of Engineering and Graduate School of Chemical Science and Engineering, Hokkaido University

1. 背景

ダイヤモンド表面と液体アルカリ金属の相互作用についてはほとんど調べられていない。我々は、高温高圧法で造られた0.3mm程度のダイヤモンド単結晶とアルカリ金属をアルゴン雰囲気下でNbカプセルに封入して加熱することによりその相互作用を調べた。特に、加熱によりエッチングが起こる様子を観察し、またダイヤモンドに含まれる窒素不純物(NV⁻中心)の蛍光により電子的な相互作用についても調べた。また、DFT計算により電子状態について検討した。

2. 結果と考察

溶融Liとダイヤモンドは600°C付近から反応してダイヤモンドがエッチングされることが分かった。安定なLi₂C₂が生じるものと考えられる。レーザー顕微鏡で観察したところ、Fig.1のように結晶面を反映していると思われる120°をなす規則的な模様が現れ、平坦面の角度を測定すると35°と70°が多く見られた。

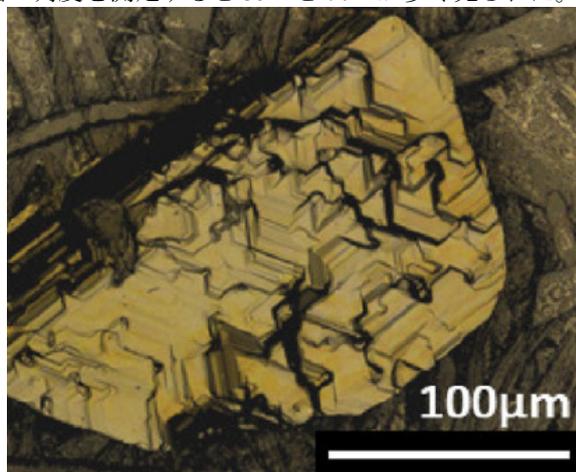


Fig. 1. 650°C20分液体Liに接触したダイヤモンド表面

これは{111}面と{110}面のなす角(35.26°), および{111}と{111}のなす角(70.52°)であると考えられる一方、他の低指数面に対応する角度すなわち90°({100}と{010}), 54.73°({111}と{100}), 45°({110}と{100})は見られなかった。これは{100}面がLiによってエッチングされる速度が速いためであると考えられる。溶融Naとの接触では800°C24時間でnmオーダーのエッチングが起こり、溶融Kとの接触では変化が観察されなかった。

NV中心の蛍光は、溶融Kとの接触でのみ顕著に減少した。これは蛍光を発する負に帯電したNV⁻の電荷が上向きのバンドベンディングにより失われたと考えられると理解できる。DFT計算(VASP²)によりバンドベンディングを見積もると、Fig.2の表面のDOSでわかるように、Kとの接触で最もバンドベンディングが大きいことが分かった。

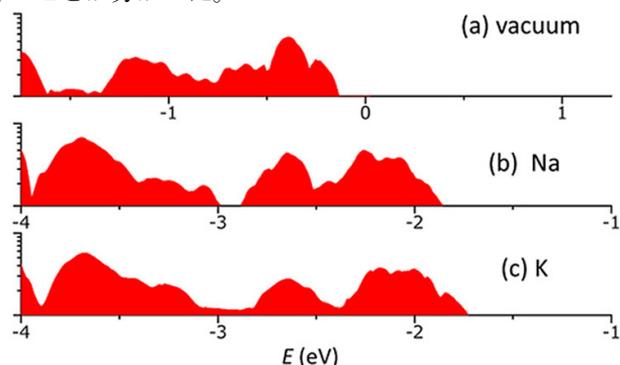


Fig. 1. DFT計算による界面の炭素の状態密度

謝辞: DFT計算には東大物性研の大型計算機を利用しました。

文 献

- 1) H. Takehana et al., Carbon 182, 585 (2021).
- 2) G.Kresse et al., Phys. Rev. B 47, 558 (1993).

*E-mail: shimadat@eng.hokudai.ac.jp