

光電子ホログラフィーによる黒リンの表面構造解析

○富田 広人¹, 黒田 健太², 橋本 由介¹, 田中 晶貴¹, 竹内 走一郎¹, 古賀 峻丞¹,
孫 澤旭¹, 田中 宏明², 近藤 猛², 高橋 敬成³, 笹川 崇男³, 松下 智裕^{1*}

¹奈良先端科学技術大学院大学, ²東京大学物性研究所, ³東京工業大学フロンティア材料研究所

Surface structure analysis of black phosphorus by photoelectron holography

○Hiroto Tomita¹, Kenta Kuroda², Yusuke Hashimoto¹, Masaki Tanaka¹, Soichiro Takeuchi¹, Shunjo Koga¹,
Zexu Sun¹, Hiroaki Tanaka², Takeshi Kondo², Takanari Takahashi³, Takao Sasagawa³
and Tomohiro Matsushita^{1*}

¹Nara Institute of Science and Technology, ²Institute for Solid State Physics, University of Tokyo,

³Laboratory for Materials and Structures Tokyo Institute of Technology

電子・光学デバイスの微細化に伴い、グラフェンをはじめとした二次元層状物質が次世代のナノデバイス材料として注目されている。黒リン(BP)は、リンの同素体で最も化学的に安定であり、フォスフォレン構造をとる二次元層状物質である。積層構造由来の良好な劈開性を持ち、常圧下において約 0.3 eV のバンドギャップを持つ半導体となるため、薄膜 FET や光通信デバイスなどへの応用が期待される。室温条件下で黒リン最表面の構造はバルクと同じであるが、密度汎関数理論(DFT)計算によって、面直方向へのわずかな緩和の可能性が報告されている¹⁾。2008 年に、超高压を必要としない合成手法²⁾が開発され、黒リンのバルク特性に関する研究が加速したが、表面構造に関する報告は少ない。BP のさらなる表面構造解析が、新機能材料の設計に寄与すると考えられる。

光電子ホログラフィーは、光電子放出強度分布が特定元素を中心とした周囲の原子配置のホログラムとなることを利用した、原子分解能ホログラフィーの一種である。本手法は、結晶構造をホログラムとして立体的に得ることで、物質の表面・界面の原子配置や電子状態、微量ドーパントの周辺構造の解析などに利用されている³⁾。先行研究では、この手法を用いた、層状物質 TiSe₂ の表面緩和⁴⁾が報告されている。

本研究では高角度分解能の光電子ホログラフィー測定装置を用いて二次元層状物質の BP を測定し、表面構造の観測を試みた。測定装置には、±49° の広い立体角と高い分解能を両立した阻止電位型電子アナライザー(RFA)を使用した。ホログラムは、SPring-8 の軟 X 線ビームライン BL25SU にて、化学気相輸送法を用いて作成した試料 P(010)表面に軟 X 線(635 eV)を照射し、P 原子の 2p 軌道電子を励起して、放出された球面波と新たに生じた散乱波の干渉による回折模様を RFA で測定した。

右図は、測定によって得られた BP のホログラムと、

シミュレーションで作成したホログラムを比較したものである。図中に示すように、実験像とシミュレーションのホログラムパターンが良好な一致を示していることがわかる。緩和によるバルクと表面近傍の層間距離の変化を推定するには、さらに精度の良いシミュレーションが必要となる。講演では詳細な解析結果について報告する。

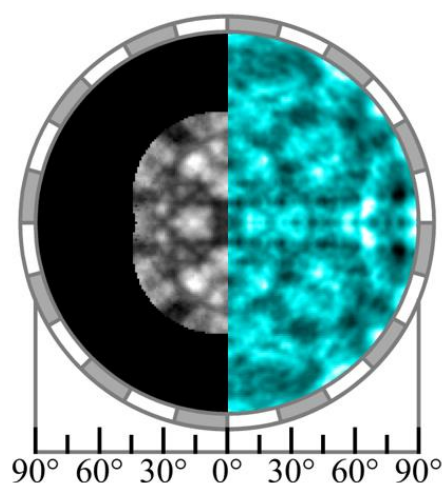


図 (左) 得られた BP の光電子ホログラム
(右) シミュレーションによる光電子ホログラム

文 献

- 1) C. D. Zhang: J. Phys. Chem. C 113, 18823-18826 (2009)
- 2) T. Nilges: J. Solid State Chem. 181, 1707-1711 (2008)
- 3) T. Matsushita: J. Phys. Soc. Jpn. 62, 17-25(2020)
- 4) M. V. Kuznetsov: Surf. Sci 606, 1760-1770 (2012)

*E-mail: t-matusita@ms.naist.jp