

論文内容の要旨

論文題目：Oxygen adsorption on Cu(001) surface and its effect on nitrogen-adsorbed substrate

訳(Cu(001)表面における酸素解離吸着とその窒素吸着表面への影響)

氏名 柳生 数馬

本論文は 3 つの内容から構成されており、すべて走査トンネル顕微鏡を用いて行なわれた研究である。

まず、Cu(001) 表面における酸素吸着の様子を調べた。試料の温度を 5 K, 80 K, 300 K (室温) の 3 つに設定し、それぞれにおいて試料を室温の酸素分子ガスにさらした。その結果、全ての温度において、酸素分子は表面で解離し、原子として吸着することが分かった。また、解離した酸素原子は $\langle 110 \rangle$ 方向の 2 格子分離れた fourfold hollow サイトにペアとして吸着した。吸着した酸素が隣接サイトや第 2 近接サイトに比べて、2 格子離れたサイトに吸着しやすことは、第一原理計算でも確かめられた。試料温度 80 K において酸素吸着を行なった後に、試料温度を室温にあげ、再び 80 K に下げて吸着した酸素原子の分布変化を調べた。室温では酸素原子が表面を動き回るため、室温にしている時間が長いほど、酸素原子のペアは減少することが分かった。この酸素原子ペアが減る早さから、酸素原子がペアから離れて孤立する際に乗り越えるポテンシャル障壁の高さを求めた。

Cu(001)表面に窒素イオンを打ち込み、表面を加熱すると、N 原子は規則的に配列し、窒素が吸着した領域は平均幅が 5 nm の正方領域となることが知られている。それらの領域の間は平均幅

が 2 nm の清浄な Cu 領域に隔てられている。この構造は窒素吸着によって生じた表面歪みを Cu 領域で緩和した結果として生じると考えられているが、表面歪みを実験的に評価した研究は非常に少ない。そこで本研究では STM の探針と表面間に形成される Image potential state を共鳴透過する電流を測定することで、表面の仕事関数の変化を求め、さらに表面歪みを見積もった。得られた歪みの方向は過去の研究と一致しており、今回の方法で得られた値は定性的に正しいことが分かった。

最後に表面歪みを変化させることで誘起される構造変化を調べた。清浄な Cu(001) 表面に窒素イオンの照射した後に、酸素雰囲気中で試料を加熱することで、酸素原子と窒素原子が共吸着した構造を作成した。この共吸着表面では酸素原子は N 吸着領域と Cu 領域の両方に吸着することが分かった。N 領域中では酸素原子が窒素原子と置換しており、STM のバイアス電圧に依存してコントラストが変化した。また、第一原理計算により酸素が含まれる N 吸着領域では歪みの緩和が起こることが確認された。共吸着表面では N 領域の端がジグザグになり、N 量が多い場合には N 領域の面積を広げることが STM 観察によって明らかになったが、これらの変化は酸素吸着による歪みの緩和で説明できた。