

NEXAFS分光法を用いた水素還元処理により MgO単結晶に誘発される欠陥の研究

Study of Defect Induced by Hydrogen Reduction in MgO Single Crystal by NEXAFS

H30海自25

派遣先 第17回X線吸収微細構造国際会議（ポーランド・クラクフ）

期 間 2018年7月22日～2018年7月29日（8日間）

申請者 九州シンクロトン光研究センター

ビームライン副グループ長 小 林 英 一

海外における研究活動状況

研究目的

本研究では水素還元処理により熱的、化学的に安定な酸化マグネシウム (MgO) に欠陥を生成し、部分蛍光収量法を用いた軟X線吸収分光により欠陥に由来する電子状態を明らかにすることを目的とした。

海外における研究活動報告

ポーランドのクラクフで開催されたX線吸収微細構造の国際会議 (17th International Conference on X-ray Absorption Fine Structure, XAFS17) で発表した。本会議は3年に1回開催され、軟X線から硬X線領域の吸収分光に関する理論、データ解析や先端的な測定技術からそれらを利用した環境、エネルギーやバイオまで幅広い領域の研究が報告される。

今回の発表では軟X線吸収分光法を用いた水素還元処理によりMgO単結晶に誘発される欠陥の研究について報告した。

MgOは典型的なワイドギャップ ($\sim 7.8\text{eV}$) の絶縁体であり、スピントロニクスや超伝導薄膜の基板など幅広い分野で使われている。それらの特性は結晶や薄膜の作製や実材料の製

造過程で生成される欠陥により大きく変化する。そのため、意図的に欠陥を制御することでそれらの特性の向上や新規の特性を発現させることが期待できる。しかしながら、MgOは熱的、化学的に安定で耐スパッタリング性に優れているため、欠陥を生成することが難しく、欠陥の導入方法が確立されていない。これまでX線、紫外線、電子線、中性子を照射したことによる欠陥について議論はされている。一方、熱化学的な還元による方法として、マグネシウム蒸気下での加熱による欠陥生成は約2400 K以上で行われており、薄膜に関しては真空中873Kで行われている。

申請者はMgO (100) を水素雰囲気中で加熱することにより、結晶中に欠陥を生成することを試みた。その結果、これまでの熱化学的な還元による方法よりも低い温度である約700 K以下の水素雰囲気中の加熱により欠陥の生成に成功した。これにより、欠陥の量は加熱温度や水素の圧力、流量により制御が可能である。

欠陥には点欠陥、線欠陥や面欠陥などの様々な種類があり、様々なモデルが提案されている。これまでMgOの水素加熱処理による欠陥については原子・電子レベルで十分に調べられていない。MgOは絶縁体であるため、フォトンイン、

フォトンアウトの蛍光収量法による軟X線吸収分光が有効である。本手法は特定の元素由来、例えば酸素やマグネシウムの伝導帯の部分状態密度を直接観測できる。本研究ではMgOの点欠陥として代表的な酸素欠陥に注目するため、酸素由来の電子状態を知ることは重要である。そこで、部分蛍光収量法を用いた軟X線吸収分光によりMgOの欠陥に由来する電子状態の測定を試みた。

水素還元処理したMgO(100)の酸素K吸収端軟X線吸収スペクトルの立ち上がりは、水素雰囲気中での加熱温度が高くなると加熱前の試料よりも低エネルギー側に立ち上がる成分が観測された。そのエネルギー位置は非占有状態の下端から約4.4 eV付近に観測された。可視光領域の吸収スペクトルの測定から酸素の欠陥に由来するギャップを求めた例は多く

あったが、本研究ではMgO(100)の水素加熱処理による欠陥準位の位置を直接、実験的に求めることができた。

会議では軟X線吸収スペクトルの測定方法や解析方法について意見交換することができた。硬X線吸収分光ではその場観察ができるため、触媒科学、環境科学やエネルギーに関する報告が多くされていた。前回のXAFS16よりも軟X線吸収分光による研究例が増えており、硬X線吸収分光と組み合わせた報告が多かった。

最後に、このような有意義な国際会議に参加する機会をご支援くださった村田学術振興財団に深く感謝致します。

**この派遣の研究成果等を発表した
著書、論文、報告書の書名・講演題目**

Study of defect induced by hydrogen reduction in MgO single crystal by NEXAFS