

高強度低速陽電子ビームによる表面構造解析 Surface Structure Analysis with a High Intensity Slow Positron Beam

H30海自53

派遣先 第18回陽電子消滅国際会議 (米国・オーランド)

期 間 2018年8月18日～2018年8月26日 (9日間)

申請者 高エネルギー加速器研究機構 (KEK)

ダイヤモンドフェロー 兵 頭 俊 夫

海外における研究活動状況

研究目的

電子の反粒子である陽電子を用いた物質研究は、陽電子と物質電子の対消滅から生じる γ 線を解析する、いわゆる陽電子消滅法がよく知られている。陽電子回折はこれとは違い、電子回折において入射粒子を電子から陽電子に置き換えた手法で、消滅する前の陽電子が作る回折パターンを解析して結晶表面の原子配列を決定する。RHEED (反射高速電子回折) の陽電子版であるTRHEPD (全反射高速陽電子回折) とLEED (低速電子回折) の陽電子版であるLEPD (低速陽電子回折) がある。ともに現在世界唯一の装置がKEK物質構造科学研究所で稼働している。陽電子回折は電子回折に比べて表面選択性が高く、解析が容易である。この特徴を利用して、基板上のグラフェンなどの2次元単原子層物質や単結晶触媒の表面原子配列を決めることを研究の目的としている。参加した国際会議における講演では、この手法の原理と特徴、および最近の成果を報告した。

海外における研究活動報告

2018年8月19日～24日の6日間、米国フロリダ州のオーランドで開催された18th International

Conference on Positron Annihilation (ICPA-18、第18回陽電子消滅国際会議) に参加して、“Surface Structure Studies with High Intensity Slow Positron Beam” というタイトルで招待講演を行った。この国際会議は、陽電子を用いる物性物理学・化学および原子物理学の最も主要な会議で、3年ごとに開催されている。今回は200名以上の参加者があり、金属、半導体、ポリマー、格子欠陥、表面、ポジトロニウム物理、実験技術などのテーマで145件の口頭発表と67件のポスター発表があった。

私の講演で報告したKEKにおける陽電子回折実験では、電子リニアック (線形加速器) を利用して大量の陽電子づくり、負の陽電子仕事関数をもつタングステンを利用して、回折実験に適したエネルギーのそろった陽電子ビームにして使っている。

報告の中心は、TRHEPDの成果であった。どの物質でも内部の静電ポテンシャルが正であるために、電子と陽電子の電荷の符号の違いが、表面感度に大きな差を生じる。

RHEEDで用いる電子は正の静電ポテンシャルに引き込まれて、表面下数層をまとめてプローブするため、多重散乱の影響もあって原子座標の解析は困難であり、最近では、表面構造の対称性の確認や、表面層成長の層の

数のモニターに広く使われているのみである。TRHEPDで用いる陽電子に対しては正の静電ポテンシャルが障壁になり、臨界角以下の視射角で入射すると全反射が起きる。この全反射条件下での回折パターンから、最表面のみの原子配置を高精度で決定できる。また、視射角を臨界角より大きくすると陽電子は結晶内部にも侵入するが、電子と違って表面に近づくように屈折するため、表面直下の原子配列の情報が得られる。さらに視射角を少しずつ大きくして、表面下数原子層までの所望の深さの情報が得られる。

このように観察深さを調節して最表面から順に原子位置を決めることができるので、解析は高精度である。さらに入射の方位角を調整して原子座標の x 、 y 、 z 成分をほぼ独立に決定することができ、これも高精度の要因になっている。この手法で、30年間確定していなかったルチル型 TiO_2 (110) (1×2) 表面の表面原子配列を決定したり (英国Royal Society of Chemistry発行のChemistry WorldのNewsの記事に取りあげられた)、Cu (111) 基板上とCo (0001) 基板上のグラフェンのバックリングの有無と基板表面との距離を確定して、遷移金属であるCo (0001) 基板上の方が表面との距離が短いことを明らかにしたりした。またAl (111) 基板表面上のゲルマニウムのバックリングの様子が、それまでの予想とは異なり非対称的であることを明らかにした。さらに、バナジウム酸化物超薄膜や新奇な2次元電子状態や超伝導を発現する2層グラフェン

層間化合物の原子配列を解析中である。

また、LEPDも2017年度に装置を立ち上げ、測定を開始している。陽電子と物質電子の間に交換相互作用がないこと、陽電子は原子核に反発されて内殻電子に近づかないことなどにより相互作用が単純なので、陽電子を用いることで解析の精度が向上する。この特徴を利用して、陽電子回折表面ホログラフィ解析やパターンソン関数を利用した表面原子配列解析を目的とするデータを取得している。

この講演で、世界唯一の装置によるTRHEPDとLEPDの成果を伝えることで、参加者の高い関心を呼んだ。特に、TRHEPD装置を開発中のドイツのミュンヘン工科大学の大学院生からは講演後も含め多くの質問を受け、それに答えてアドバイスをした。これを機に、他の国でも陽電子回折を始める機運がますます高まり、表面原子配列決定の標準的な手段となることを期待している。

最後に、この国際会議に参加して招待講演を行い、研究成果を広く発信する貴重な機会を与えて下さった村田学術振興財団に、心より厚く御礼申し上げます。

**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**

T. Hyodo, "Surface Structure Studies with High Intensity Slow Positron Beam"
18th International Conference on Positron Annihilation,
Plenary 5-1, Orland, USA, 23 August 2018.