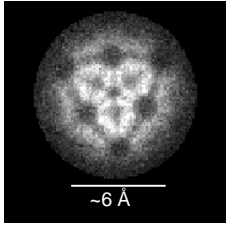


低速原子散乱分光法を用いた 絶縁性材料の表面構造解析



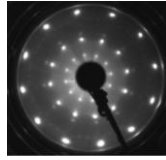
大阪公立大学
国際基幹教育機構 講師

譚(タン) 廣(ゴオン)

図 CoO(111)表面構造パターン Osaka Metropolitan University

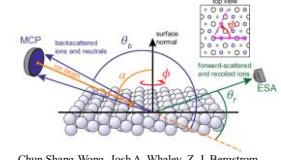
Intro.1 表面分析の手法

低速電子回折 (LEED)



W. Meyer, K. Biedermann, M. Gubo, L. Hammer, and K. Heinz, Phys. Rev. B 79, 121403(R) (2009).

低速イオンビーム散乱 (LEIS)

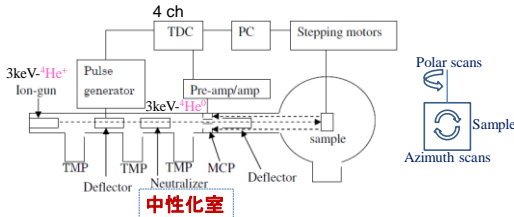


Chun-Shang Wong, Josh A. Whaley, Z. J. Bergstrom, Brian D. Wirth, and Robert D. Kolasinski, Phys. Rev. B 100, 245405 (2019).

- イオンビームや電子線などの荷電粒子線を用いた場合、絶縁体表面では**チャージアップ(電荷蓄積)**が起こり、測定が困難である。
- チャージアップを抑えるための工夫が必要。

Osaka Metropolitan University

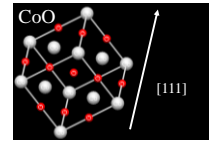
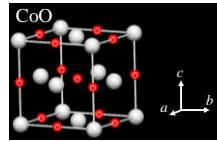
Intro.2 低速原子散乱分光法について



- Primary incident beam 3keV-⁴He⁰, 3keV-²⁰Ne⁰
- Pulse generator (Deflector bias voltage +50 V)
- The chopping frequency 100 kHz
- Time-of-flight analysis (飛行時間スペクトル)

• H. Fukuta, K. Umezawa, M. Yoshimoto, Nuclear Inst. and Methods in Physics Research B 479 (2020).
• T. Suzuki, R. Souda, Surf. Sci. 442 (1999) 283. Osaka Metropolitan University

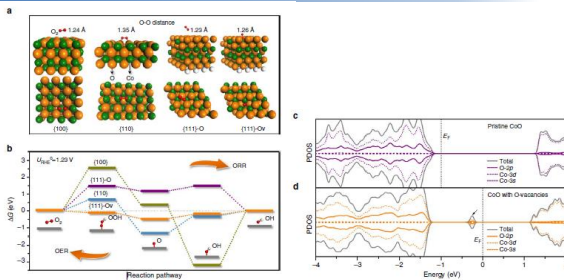
本研究: 絶縁性酸化物CoO(111)の表面構造解析



- Sample: CoO(111) 5 × 5 × 0.5t (mm) (Crystal base Co. Ltd)
- Rocksalt (fcc)
- Band gap ... 2.2–2.8 eV
- Melting Point ... 1933 C
- Lattice constant ... 4.262 Å
- Applications ... Battery electrodes, gas sensors, Catalyst

N. Aldoust, M. Lessio, and Emily A. Carter, J. Appl. Phys. 119, 025102 (2016).
A. Matsuda, R. Yamachida, D. Shoji, G. Tan, S. Kaneo, M. Yoshimoto, Appl. Surf. Sci. 349 78 (2015).
T. Ling, D. Y. Yan, Y. Jiao, H. Wang, Y. Zheng, X. Zheng, J. Mao, X. W. Du, Z. Hu, M. Jaroniec & S. Z. Qiao, Nat. Commun. 7, 12876 (2016). Osaka Metropolitan University

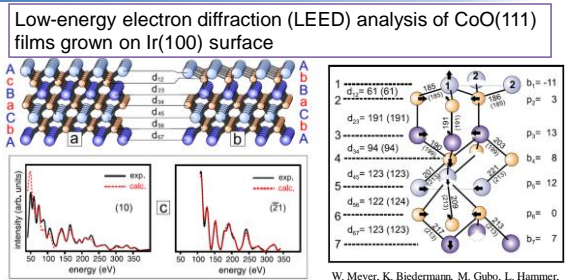
Intro.1 触媒応用におけるCoO表面



計算により、酸化コバルトの電気化学活性は表面の**酸素欠陥**に起因するという報告がある。

T. Ling, D. Y. Yan, Y. Jiao, H. Wang, Y. Zheng, X. Zheng, J. Mao, X. W. Du, Z. Hu, M. Jaroniec & S. Z. Qiao, Nat. Commun. 7, 12876 (2016). Osaka Metropolitan University

Intro.2 CoO(111)の表面報告例

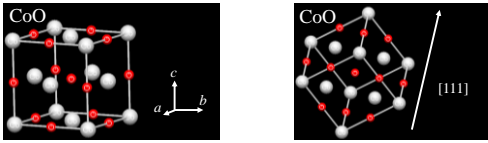


W. Meyer, D. Hock, K. Biedermann, M. Gubo, S. Müller, L. Hammer, and K. Heinz, PRL 101, 016103 (2008).

- 最表面4層のみワルツサイト構造であることを示唆。
- CoO(111)の表面構造はまだ明らかになっていないことが多い。

Osaka Metropolitan University

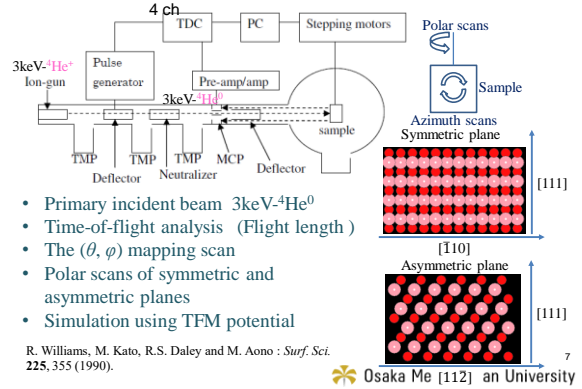
研究目的



- 最表面の構造は、ロックソルト構造か、ウルツサイト構造なのか？
- CoO(111)の最表面原子層は、**Oxygen or Cobalt** ?
- 表面緩和、表面再構成はあるのか？

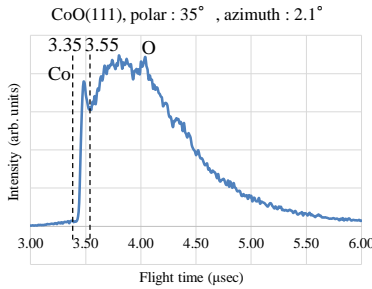
Osaka Metropolitan University

実験 Low energy atom scattering spectroscopy



Osaka Me [112] an University

Result1: TOF spectrum: 3 keV-⁴He⁰ -> CoO(111)

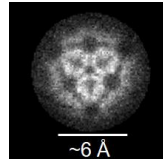


- 電氣的に中性な原子ビームを用いることで、飛行時間スペクトルを取ることができた。

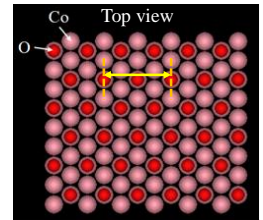
Osaka Metropolitan University

Result2 : (θ, φ) mapping patterns of CoO(111)

The (θ, φ) mapping image



Co signals

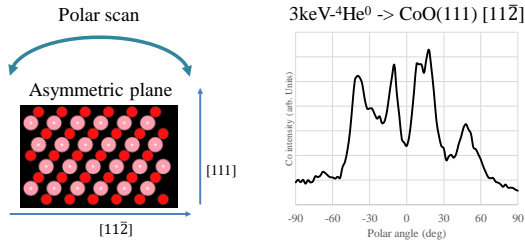


Top view of CoO(111) surface

- 結晶構造に由来する三角形のパターンが得られた。

Osaka Metropolitan University

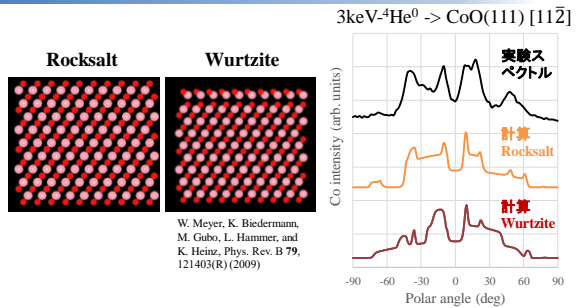
Result3: TOF polar scan along the [11-2] azimuth



- Polarスキャンで、より詳細な実験スペクトルを測定した。

Osaka Metropolitan University

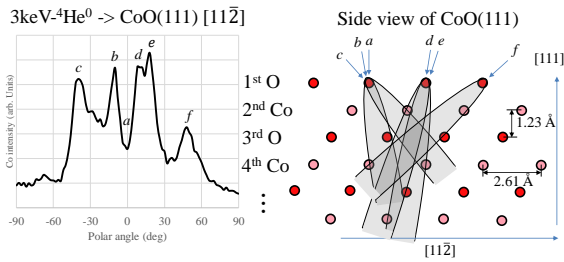
Result4: TOF polar scan along the [11-2] azimuth



- シミュレーションにより、今回測定したCoO(111)単結晶表面はバルク(内部)と同じロックソルト構造であることがわかった。

Osaka Metropolitan University

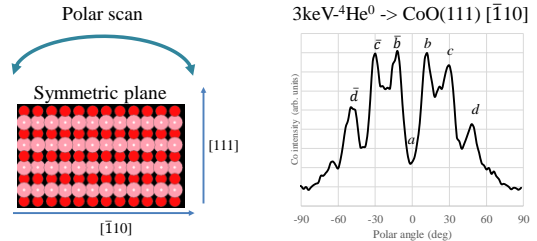
考察: TOF polar scan along the [11-2] azimuth



- フォーカシング効果による信号の増幅の結果、大きなピークが得られる。

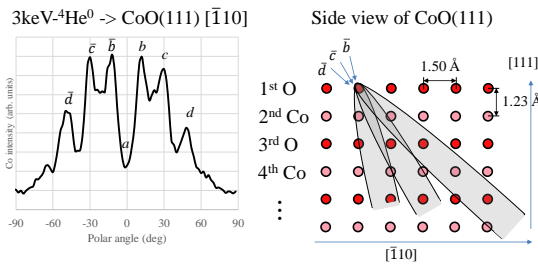
Osaka Metropolitan University

Result5: TOF polar scan along the [-110] azimuth



Osaka Metropolitan University

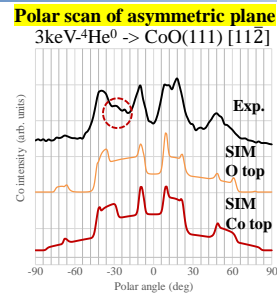
考察: TOF polar scan along the [-110] azimuth



- 非対称の方向のスペクトル結果と同様、結晶構造に対応した結果が得られた。

Osaka Metropolitan University

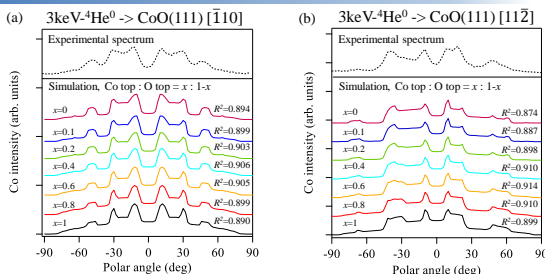
Result6: Simulation (SIM), Co or O (1st layer)



- 最表面原子層に関しては、酸素およびコバルトの最表面で計算した場合の両方の特徴を持っていた。

Osaka Metropolitan University

Result7: top-most layer of CoO(111)



G. Tan, H. Fukuta, K. K. H. De Silva, A. Matsuda, M. Yoshimura, M. Yoshimoto, and K. Umezawa, J. Vac. Sci. Technol. A 40, 065202 (2022).

- シミュレーションの結果より、表面の40%–60%はCo終端で、残りO終端であることが示唆された。(酸素欠陥)

Osaka Metropolitan University

Summary of surface studies of CoO(111)

酸化コバルト結果まとめ:

- 原子ビームを用いることで、絶縁性酸化物表面を観察。
- 酸化コバルト再表面がロックソルト構造であることを観察。
- 再表面は40%–60%はCo終端で、残りO終端であることが示唆された。(酸素欠陥)

謝辞: 株式会社パスカルの故・中西繁光氏(大阪府立大学名誉教授)、および長澤裕樹氏、大阪公立大学、梅澤憲司氏、福田浩昭氏に感謝を申し上げます。

Osaka Metropolitan University