



| | |
|--------------|---|
| Title | エキソ電子放射メカニズム解明のための理論的アプローチ |
| Author(s) | 森田, 雅史; 塩田, 忠; 田川, 雅人 他 |
| Citation | 大阪大学大型計算機センターニュース. 1998, 110, p. 7-9 |
| Version Type | VoR |
| URL | https://hdl.handle.net/11094/66303 |
| rights | |
| Note | |

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

エキソ電子放射メカニズム解明のための理論的アプローチ

大阪大学大学院 物質・生命工学専攻 森田雅史・塩田忠・田川雅人・梅野正隆
E-mail : morita@asf.mls.eng.osaka-u.ac.jp

1. はじめに

固体表面に仕事関数以上のエネルギーを熱や光により与えたり、トンネル効果が生じるような高電界を印加すると固体表面から電子が放射される。これらは光電子放射、熱電子放射、電界放射として広く知られている電子放射現象であるが、これらの良く知られた電子放射の他に、固体表面に吸着物や欠陥等が存在する場合、一過性かつ低エネルギー電子の放射が見られることがある。このような電子はエキソ電子と呼ばれており、吸着物・不純物・表面欠陥などの表面に対する外的擾乱に敏感であるため、表面の探傷技術や低エネルギー放射線線量計等への応用が期待されている。これまで本研究グループでは高電界印加時に観測されるエキソ電子放射メカニズム解明のための実験的な研究をおこなってきた[1][2]。しかしながら、エキソ電子放射は一過性であり、且つ well-defined な表面では生じないことから、表面に加えられた擾乱の度合いとエキソ電子放射量との相関関係に関する定量的議論が困難であり、エキソ電子の放射メカニズムに関しては未だに統一的な見解が得られていないというのが現状である。

一方、近年目覚しく発展してきた量子力学的計算手法により物質の電子状態は計算機内である程度再現することができるようになり、理論的側面からのアプローチの有用性も注目されるようになってきた。そこで本研究グループではエキソ電子放射の研究に第一原理に基づく電子状態計算を世界で初めて取り入れ、エキソ電子放射の研究に対して理論的側面からのアプローチを行っている。本研究の最終的な目標は、第一原理的な電子状態の計算手法を取り入れたプログラムを用いて、外部から加えられた擾動（表面の吸着物や表面欠陥など）に対する系の電子状態の乱れを計算し、実験結果と比較することによりこれまでの系の複雑性によって不明確であったエキソ電子放射サイトの形成要因や分布状態を実験と計算の両面から明らかにしようとするものである。

2. 計算方法

電子状態の計算には東京大学大学院理学研究科の塚田研究室のグループによって開発された BB-VB プログラムを使用している。この BB-VB プログラムは、Vanderbilt[3]により提案されたウルトラソフト擬ポテンシャルを適用した平面波基底のバンド計算により、原子位置に関する全エネルギーの最適化を行うプログラムである。計算理論ならびにプログラムについては参考文献[4]に詳説されているのでここでは省略するが、このプログラム

により入力した系の構造最適化を行うことが可能であり、また電子状態としてバンド構造、電荷密度、状態密度などの情報が得られる。

本研究において取り扱う系としては、比較的計算が容易で過去にエキソ電子放射に関する研究例も多い Al を選び、固体内部、(001)表面、酸素吸着した表面や表面欠陥・ステップ構造の存在する表面などさまざまな系について理論計算を行っている。このような電子状態の計算には膨大な計算量を必要とするが、その遂行が可能となった背景には近年のコンピューター技術のめざましい発展がある。本研究では当初、大阪大学計算機センターのワークステーションを使用し計算を行っていたが、より実表面に近い計算を行うためには大規模な系を取り扱う必要性が生じたことから、現在では全ての計算を同計算機センターのスーパーコンピューター SX-4 に移行し、計算を行っている。

3. これまでの成果

これまでに得られた成果の一部として、Al の固体内部と(001)表面の基本的な計算結果を紹介する。計算に用いたモデルは、図 1 に示すような Al の層と真空領域を組み合わせたスーパーセルを三次元的周期構造に配置したものである。図 1 は Al が 5 層の(001)表面の例を示しているが、固体内部の計算の場合には上下各 3 層の真空領域を除いて 3 次元周期境界条件のもとで計算を行った。表面系の計算を行う前に Al の固体内部の計算を行い、固体内部の電子状態をよく再現できるような擬ポテンシャルを構築し、それにより求められた格子定数と体積弾性率を実験値

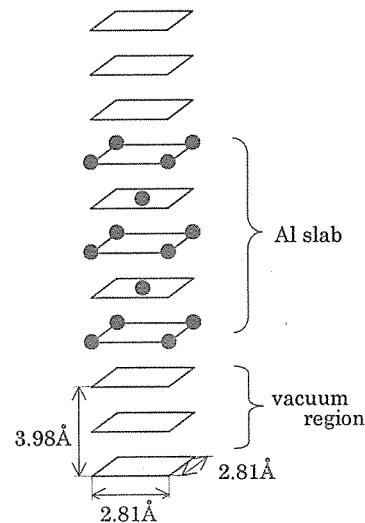


図 1 計算に用いたスーパーセル

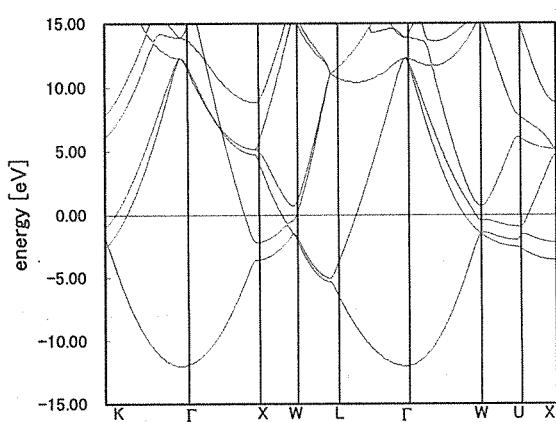


図 2 Al 固体内部のバンド構造

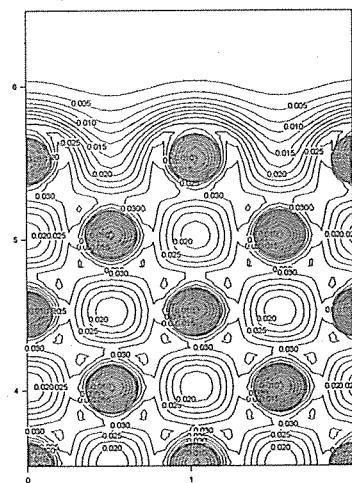


図 3 Al(001)表面の価電子の電荷密度分布

と比較した。格子定数は実験値 4.02\AA に対し 3.98\AA (誤差 1.0%)、体積弾性率についても誤差は 3.6% となりいずれも実験値をよく再現できることが判った。この擬ポテンシャルを用いて、Al の固体内部のバンド構造を計算した結果が図 2 である。この計算結果は他者により計算された結果[5]と全く同様であり、擬ポテンシャルを用いた本計算の信頼性が確認された。

Al(001)表面での電子状態計算には Al が 9 層で真空領域を約 10\AA とったスーパーセルを用いた。構造最適化を行った結果、最表面の面間隔が約 0.4% 増大する表面緩和構造が安定であるという計算結果が得られた。この計算結果は、Al(001)面においては表面緩和構造は観察されないという実験結果[6]に対応するものと考えられ、表面緩和構造についても実表面をよく再現できる事が分かった。図 3 に価電子の電荷密度の分布を示す。図中のグレーの丸が Al 原子の位置である。図には [100] 方向の断面での表面第 5 層までの電荷密度分布が示されており、これより 3 次元での価電子の分布状態を把握する事が出来るようになった。

4. おわりに

以上述べてきたように、本計算を用いることにより、Al に関する理論計算から安定構造、電子のエネルギー、状態密度、実空間での電荷分布などの情報が得ることが出来る。そして現在では、先述した Al の清浄表面に引き続き、酸素吸着表面や点欠陥が存在する表面に関する理論計算を行い、計算結果を実験結果と比較しつつある。今後はステップ構造を有する表面や初期酸化過程での電子状態についても計算を行い、Al 表面からのエキソ電子放射メカニズムの解明を目指す。また近年本研究グループによって行われている W からのエキソ電子放射に関する実験に対応させるため、Al と同様の計算を W でも行う予定である。

最後に、本研究を遂行するにあたりプログラムを御提供下さいました姫路工業大学島信幸先生、ならびに計算に関する御助言を頂きました本学笠井秀明先生、志村考功先生に心よりお礼申し上げます。

参考文献

- [1] M. Tagawa, K. Tsuzuki, M. Mori, N. Ohmae and M. Umeno, *Appl. Phys. Lett.*, **61** (1992) 1471.
- [2] T. Shiota, M. Morita, M. Tagawa, N. Ohmae and M. Umeno, *Ultramicroscopy* **73** (1997) 217.
- [3] D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B*, **43** (1990) 7892.
- [4] J. Yamauchi, M. Tsukada, S. Watanabe and O. Sugino, *Surf. Sci.*, **341** (1995) L1037.
- [5] Keun-Ho Lee and K.J. Chang, *Phys. Rev. B*, **49** (1994) 2362.
- [6] D. Aberdam, R. Baudoing and C. Gaubert, *Surf. Sci.*, **57** (1976) 715.