

# 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)による結晶最表面の原子配列解析

兵頭 俊夫

KEK 物質構造科学研究所

物質表面の特性や機能は、表面原子の種類とその配列によって完全に決定される。したがって、最表面および表面近傍の原子配列の正確な知識は、特性の深い理解および、新規機能のさらなる開発のために重要である。

RHEED (反射高速電子回折) の陽電子版である全反射高速陽電子回折 (Total-reflection high-energy positron diffraction, TRHEPD、トレプト) は、最表面の原子配列と表面下の原子配列の感度が非常に高いため、この目的に適した測定手段である。この手法は、1992年に一宮によって提案され[1]、1998年に河裾・岡田によって実現された[2]純日本発の計測技術である。KEK 物構研における高強度低速陽電子ビームの利用により、測定時間が短縮され、表面解析技術として確立した[3]。

TRHEPDの表面超高感度の起源は、結晶中の陽電子のポテンシャルエネルギーが正であることである [4]。このため、臨界角より小さな視射角で入射すると全反射が起き、最表面だけの原子配列による回折パターンが得られる (図 1)。また、視射角が臨界角を超えると陽電子は結晶中に侵入するが、表面に近づくように屈折するため、表面直下から順に観察深さを変えて観測することができる。これらは、RHEED や SXR D (表面 X 線回折) にはない特徴である。

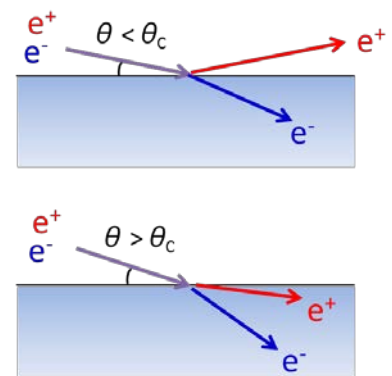


図 1

表面感度が高いので、測定は陽電子電流強度 0.1pA で行われている。そのため、絶縁体の測定においても、測定中に表面構造の破壊や帯電によるデータの劣化が見られることはない。これは、酸化物の表面構造解析には極めて有利な特徴である。

以下のような最近の成果を紹介する。

(1) rutile-TiO<sub>2</sub>(110)(1×2) 表面は構造が複雑で、30 年以上にわたって議論が続いていたが、望月ら[5]によって、Wang ら[6]が、USPEX コードによる膨大な計算で原子組成と原子配列を同時に最適化して得たモデルが正しいことが示された。続いて、新たな低次元量子物性の舞台として注目されている anatase-TiO<sub>2</sub>(001)(1×4) 表面の原子配列解析を行っている。

(2) 種々の固体基板上で合成されたグラフェン[7]、シリセン[8]、ゲルマネン[9]などの、原子シート物質の基板との距離およびバックリングの詳細の決定に成功している。

(3) 2 次元超伝導の発現で知られている 2 層グラフェン間に金属をインターカレートした構造詳細を解析し、従来考えられていたのとは異なる構造であることを見いだした[10]。

本研究は、PF 共同利用 No.2010G652, 2012G653, 2013U002, 2014S2-004 と、JAEA-KEK 共同開発研究で実施された。また、科学研究費補助金(S)24221007 の支援を受けて行われた。

## References

[1] A. Ichimiya, *Solid State Phenom.* **28/29**, 143 (1992). [2] A. Kawasuso and S. Okada, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2695 (1998). [3] Y. Fukaya, et al., *Appl. Phys. Express* **7**, 056601 (2014). [4] T. Hyodo et al., *J. Phys.: Conf. Ser.* **791**, 012003 (2017). [5] I. Mochizuki et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **18**, 7085 (2016). [6] Q. Wang et al., *Phys. Rev. Lett.*, **113**, 266101 (2014). [7] Y. Fukaya, et al., *Carbon* **103**, 1 (2016). [8] Y. Fukaya, et al., *Phys. Rev. B* **88**, 205413 (2013). [9] Y. Fukaya, et al., *2D Materials*, **3**, 035019 (2016). [10] 遠藤由大他、日本物理学会年次大会 (2018) ポスター(22pPSD-71).