



金属酸化物ハイパーマテリアル超薄膜の創製と構造

柚原淳司¹、李 旭¹、前田匠太¹、高倉将一²、仲武昌史²
¹名古屋大学工学研究科、²あいちシンクロトロン光センター

キーワード：酸化物ハイパーマテリアル、光電子分光

1. 背景と研究目的

2013年にFörsterらは、Pt(111)表面上にBaTiO₃からなる酸化物準結晶を発見した[1]。また、酸化物準結晶と同じ四角形および三角形からなる酸化物近似結晶も観察されている[2]。各原子密度を基いて、酸化物準結晶と近似結晶の構造モデルが提案された[3-4]。更に、同じクラスターを持つ酸化物準結晶は、Pt(111)表面上にSrTiO₃薄膜から作製された[5]。ここで、CeTiO₃の格子定数がBaTiO₃とSrTiO₃の格子定数に近いため、本研究の目的は、Ce-Ti-O準結晶薄膜の創製と構造の解明することである。

2. 実験内容

試料は、Pt(111)単結晶を用いた。実験は超高真空チャンバー内にてPt(111)表面を清浄化し、その後、表0.5 ML Ceと3 ML Tiを蒸着し、酸素雰囲気加熱と真空加熱することで、Ce-Ti-O-(3×3)超構造を作製した。この構造におけるCe 4f電子の化学結合状態についてX線吸収分光(XAS)により調べた。

3. 結果および考察

X線の入射角度が表面からの仰角15°および90°にて、XAS測定を行った。得られたスペクトルを図1に示す。一般に、4fのCe³⁺の純粋な $|J_z\rangle$ 状態のM4 ($h\nu = 877\sim 887$ eV) およびM5 ($h\nu = 895\sim 905$ eV) 由来のXASスペクトルは、完全多重項理論を含むイオン計算に基づいて、c軸に平行または垂直の2つの電場ベクトルの分極で説明される。今回のスペクトルの形状から、Ceの各状態は特徴的な強い分極依存性を持っていることがわかり、このような分極依存性は各 J_z 状態の4f電子の空間分布であることを示している。先行研究[6]の計算結果と比較では、Ce-Ti-O-(3×3)超構造は、Ce 4f電子の波動関数が $J_z = \pm 3/2$ 状態であることがわかった。以上より $J_z = \pm 3/2$ 状態における4f電子の空間分布がPt(111)表面に対して垂直に分極していることが判明した。

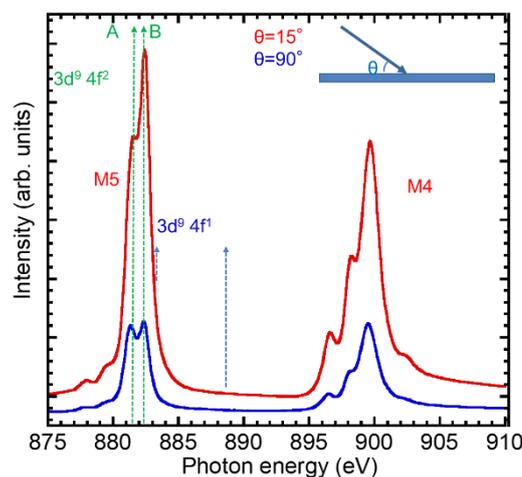


図1 Ce-Ti-O(3×3)超構造薄膜のCe 4f電子のX線吸収分光スペクトル

4. 参考文献

- [1] S. Förster *et al.*, *Nature* **502**, 215 (2013).
- [2] S. Förster *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 095501 (2016).
- [3] J. Yuhara *et al.*, *Phys. Rev. Materials* **4**, 103402 (2020).
- [4] X. Li *et al.*, *Appl. Surf. Sci.* **561**, 150099 (2021).
- [5] S. Schenk *et al.*, *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 134002 (2017).
- [6] P. Hansmann *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 066405 (2008).