## 研究成果報告書

## (国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		配列状態制御分子ビームを用いた銅表面の化学反応制御									
研究テーマ (欧文) AZ		Control of Surface Chemical Reactions on Cu surfaces by Aligned Molecular Beams									
研究氏	ከタカナ cc	姓)オカダ	名)ミチオ	研究期間 в	2011	~ 2012	年				
	漢字 CB	岡田	美智雄	報告年度 YR	2013	年					
代 表名 者	<b>□-マ字</b> cz	OKADA	Michio	研究機関名	大阪大学						
研究代表者 cp 所属機関・職名		大阪大学大学院理学研究科									

概要 EA (600字~800字程度にまとめてください。)

表面・界面がもつ機能性の解明には、表面化学や原子・分子化学の立場からの新しい手法の導入が 必須である。我々は、表面のもつ機能を高い空間・時間分解能で理解することを目指す中で、衝突誘 起アライメント機構を応用した表面反応立体ダイナミクス研究のための超高真空対応型配列分子線 発生装置の開発を行ってきた。六極磁場を用いる配列制御に比べて、扱える分子種の幅が広いのが特 徴である。現在、装置は完成し、ビームを発生しながら調整を行っているところであり、今後表面反 応研究に応用していく予定である。以下、銅金表面の酸化反応過程に関する研究について報告する。 次世代のナノ配線材料や新規太陽電池の基板として銅(Cu)をベースとしたナノ構造は有用であるこ とが期待されている。我々は、その Cu の酸化プロセスのダイナミクスを詳細に理解し極薄ナノ酸化 膜生成を制御しようとしている。一方で、配線材料という観点からは、酸化による腐食が重要な問題 となる。腐食過程としての酸化過程を解明し、耐腐食性の高い材料の開発が求められている。本研究 では、特に Cu を含有する CuAu 合金表面に着目し、極薄酸化膜生成反応における合金化の効果とその 表面温度依存性に関する重要な知見について明らかにした。2 eV 程度の並進エネルギーをもつ超熱領 域の酸素分子線(HOMB)による Cu表面の酸化物生成過程が、合金化にどのように依存するかについて、 高分解能×線光電子分光法(XPS)を用いて調べた。Cu<sub>3</sub>Au(111)および Cu(111)表面の HOMB による酸化 過程の比較から Cu3Au(111)にはバルクへの酸化を抑える保護膜機能があることがわかった。 この保護 膜機能は面指数に依存しており、今後この機能は腐食過程制御に向け利用できる可能性がある。今後 は前述の配列分子線装置を用いて、酸化物生成にどのように分子配列が寄与するか、立体化学的立場 から調べる予定である。

キーワード FA	分子ビーム	量子状態(配列状態)制御	表面化学反応制御	銅酸化過程

## (以下は記入しないでください。)

助成財団コード⊤ム			研究課題番号 🗚					
研究機関番号 AC			シート番号					

発表文献(この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。)												
雑誌	論文標題GB	Temperature dependence of $\text{Cu}_2\text{O}$ formation on $\text{Cu}_3\text{Au}(110)$ surface with energetic $\text{O}_2$ molecular beams										
	著者名 GA	M. Hashinokuchi 他3名	雑誌名 GC	Applied Surface Science								
	ページ GF	投稿中	発行年 GE	2	0	1	3	巻号 GD				
雑誌	論文標題GB	Oxidation of TiAl surface with hyperthermal oxygen molecular beams										
	著者名 GA	M. Hashinokuchi 他 4 名	雑誌名 GC	Applied Surface Science								
	ページ GF	276 <b>~</b> 283	発行年 GE	2	0	1	3	巻号 GD	276			
雑	論文標題GB											
誌	著者名 GA		雑誌名 GC									
	ページ GF	~	発行年 GE					巻号 GD				
[57]	著者名 HA											
書	書名 HC											
	出版者 нв		発行年 HD					総ページ HE				
図書	著者名 HA											
	書名 HC											
	出版者 нв		発行年 HD					総ページ HE				

## かず 要 57

We have studied how the initial conditions of an incident molecule, i.e. translational energy and/or internal states, affect on the following surface chemical reactions. For that purpose, we have constructed new apparatuses for elucidating the mechanisms of surface chemical reactions by controlling the molecular orientation and alignment. We consider that, in this research project, we could develop the basis for the research of stereodynamics of surface chemical reactions. The apparatus of the alignment-controlled molecular beam is almost constructed and is now under tuning. Here, we report the preliminary results of the Cu and its alloy oxidation using the molecular beams. Corrosion wastes more than a few percent of the world's GDP. The initial stage of the corrosion is one of the central topics in material science. The oxidation is a major The growth of a protective thin surface layer, which prevents further oxidation corrosion process of metals. into bulk of a metal, requires the formation of a homogeneous film. This is a quite important issue in various fields like electronic devise technology and so on. One simple way for the protection of underlying metals is surface alloying, combining different substances to form multi-component surfaces. The surface alloying leads to the formation of a protective oxide layer over the alloy surface due to the preferential oxidation of one component, possibly with segregation. Two key factors control the protective oxide-layer formation: stability and oxide homogeneity. It is still not generally understood which alloying elements improve the likelihood of forming a protective oxide in the wide range of incident energy of O<sub>2</sub>. In the present research, we performed our detailed studies on the initial oxidation process of Cu<sub>3</sub>Au (111) with a hyperthermal O<sub>2</sub> molecular beam with varying its incident energy. Oxidation has been monitored in situ by X-ray photoemission spectroscopy performed with synchrotron radiation. The experimental results suggest that the combination of the surface Cu-O layer and the second Au-rich layer works as a perfect protective layer even for the energetic  $O_2$ . In the near future, we will elucidate the stereodynamical view of these chemical reactions using newly constructed apparatus.