

クラスターイオンビームと固体表面の相互作用

Interaction between cluster ion beams and solid surfaces

京都大学大学院工学研究科附属光・電子理工学教育研究センター 龍頭啓充

研究成果概要

本研究は多原子分子を材料としたクラスターイオンと固体表面の相互作用について調べることを目的としている。クラスターイオンビームを加速し、固体表面に照射すると高温・高圧の反応場が形成されることが分子動力学計算により示されてきた。また最近、クラスターイオンが固体表面に衝突する際に微弱な発光が生じることが分かり、このスペクトルを解析することにより、クラスターイオンが固体表面に衝突する際の高温状態を実験的に観測することが出来た。この高温・高圧の反応場が多原子分子を材料とするクラスターと固体表面との衝突で形成される場合は、クラスターを構成する分子と固体表面の原子との間で強い化学反応が生じることが予想される。そこで代表的な多原子分子を材料とするクラスターであるエタノールが銅、タンタル、プラチナ等金属の表面に衝突する過程について **Materials Studio** を用いたシミュレーションを行った。

はじめに銅、タンタルまたはプラチナの表面を準備した後、真空中にエタノールを配置し、**CASTEP** の **Dynamics** 計算を行った。エタノールクラスターイオンビームを銅、タンタル、プラチナ等の表面に照射する実験では、金属薄膜の成膜後、大気曝露せず真空中に保ったままで照射した場合のスパッタ率が、成膜後に一度大気中に取り出し、後に照射した場合に比べて高いことが分かっているが、今回行ったシミュレーションは大気曝露せず真空中に保ったままでエタノールを照射した場合に相当する。エタノール分子が金属表面に垂直に近づく初速度として  $50 \text{ \AA/ps}$ 、 $100 \text{ \AA/ps}$ 、 $150 \text{ \AA/ps}$ 、 $200 \text{ \AA/ps}$  または  $300 \text{ \AA/ps}$  を与え、 $0.5 \text{ fs}$  または  $1 \text{ fs}$  間隔でシミュレーションを行った。初速度及び標的金属試料の違いにより、エタノール分子中の水素の乖離の状況や、エタノール分子中の水素、酸素、炭素原子が金属表面原子と結合する状況に違いが見られた。

発表論文(謝辞なし)

1. H. Ryuto, Y. Shimizu, M. Yamaoka, D. Shimizu, D. Yamamoto, M. Takeuchi, F. Musumeci, "Sputtering and photon emission of metal surface induced by cluster ion collision", International Union of Material Research Societies-The 15th International Conference on Advanced Materials (IUMRS-ICAM2017), Aug. 27-Sept. 1, 2017, Kyoto.