

異種金属界面における金属薄膜成長の原子構造とメカニズム

Atomic Structures and Mechanisms of Metal Thin-Film Growth at Heterometal Interfaces

大阪公立大学大学院工学研究科 博士後期課程3年 水原葵



This paper: Ni-Ag Surface Science (2025)

金属薄膜成長

金属薄膜成長とは、金属の原子が基板の上に並んで薄い膜をつくる現象。材料の組み合わせや温度によって原子は平らに広がったり、小さな島のように集まった。この「並び方」の違いが電気や磁気などの性質を大きく左右する。

• 主な成長モード：Frank-van der Merwe (層状成長), Volmer-Weber (島状成長), Stranski-Krastanov (層+島成長)

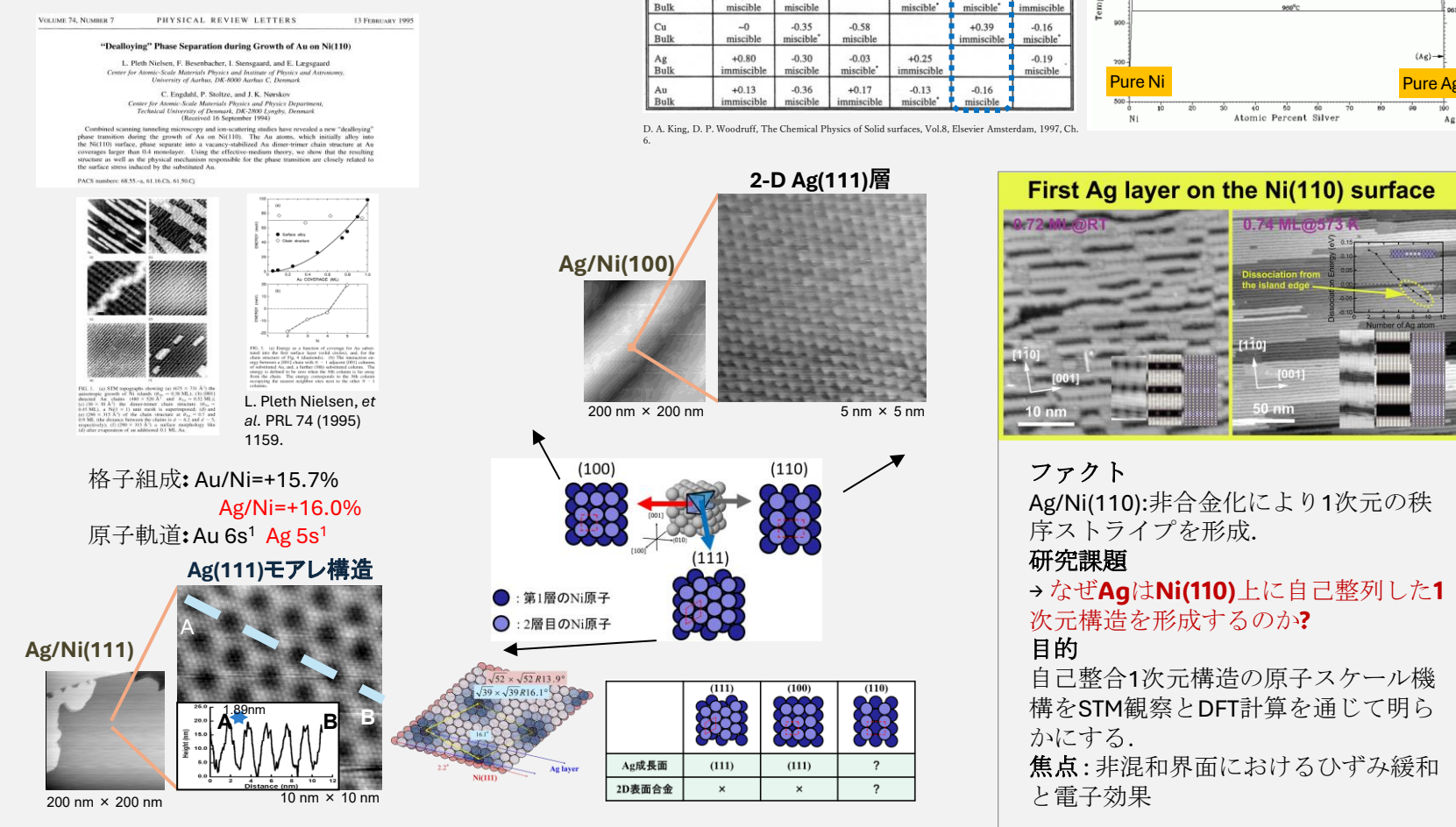
応用例：電子機器の微細配線, 量子コンピュータ, 磁気記録材料, 触媒反応などに活用されている。



研究対象の系1 (Ni-Ag系)

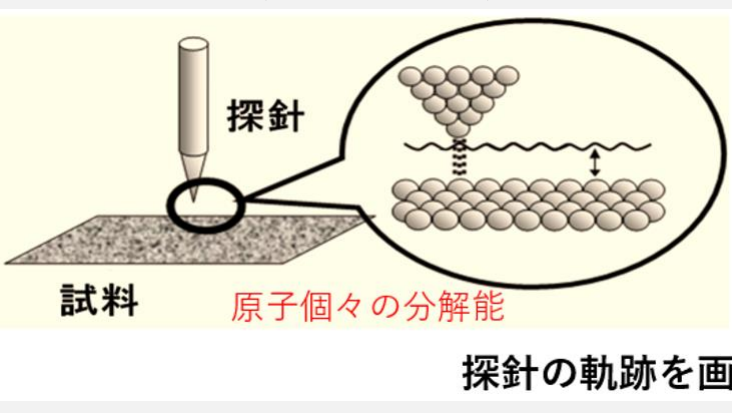
なぜNi/Agなのか?

Au/Ni → 非混和性金属
Au被覆率拡張を有するAu/Ni(110)合金
→ Au被覆の増加による脱合金化転移

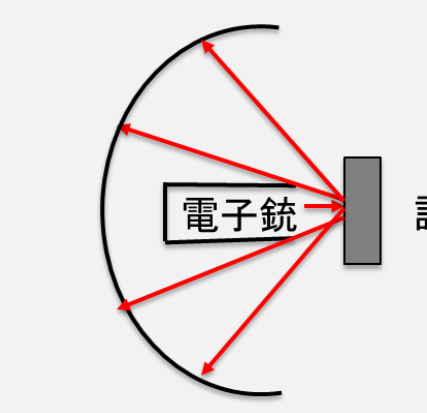


実験方法, 計算方法

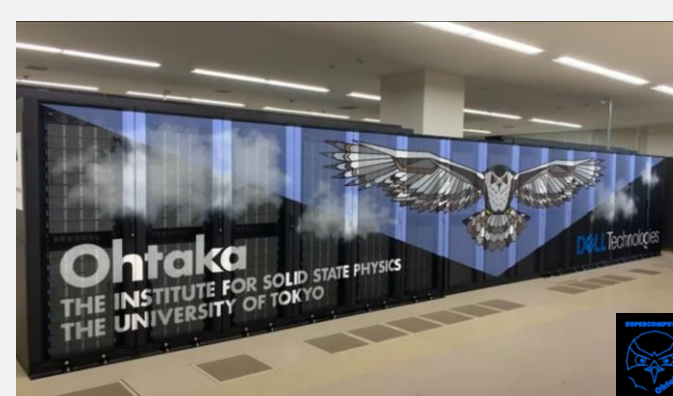
• 超高真空走査型トンネル顕微鏡 (UHV-STM)



• 低速電子線回折 (LEED)

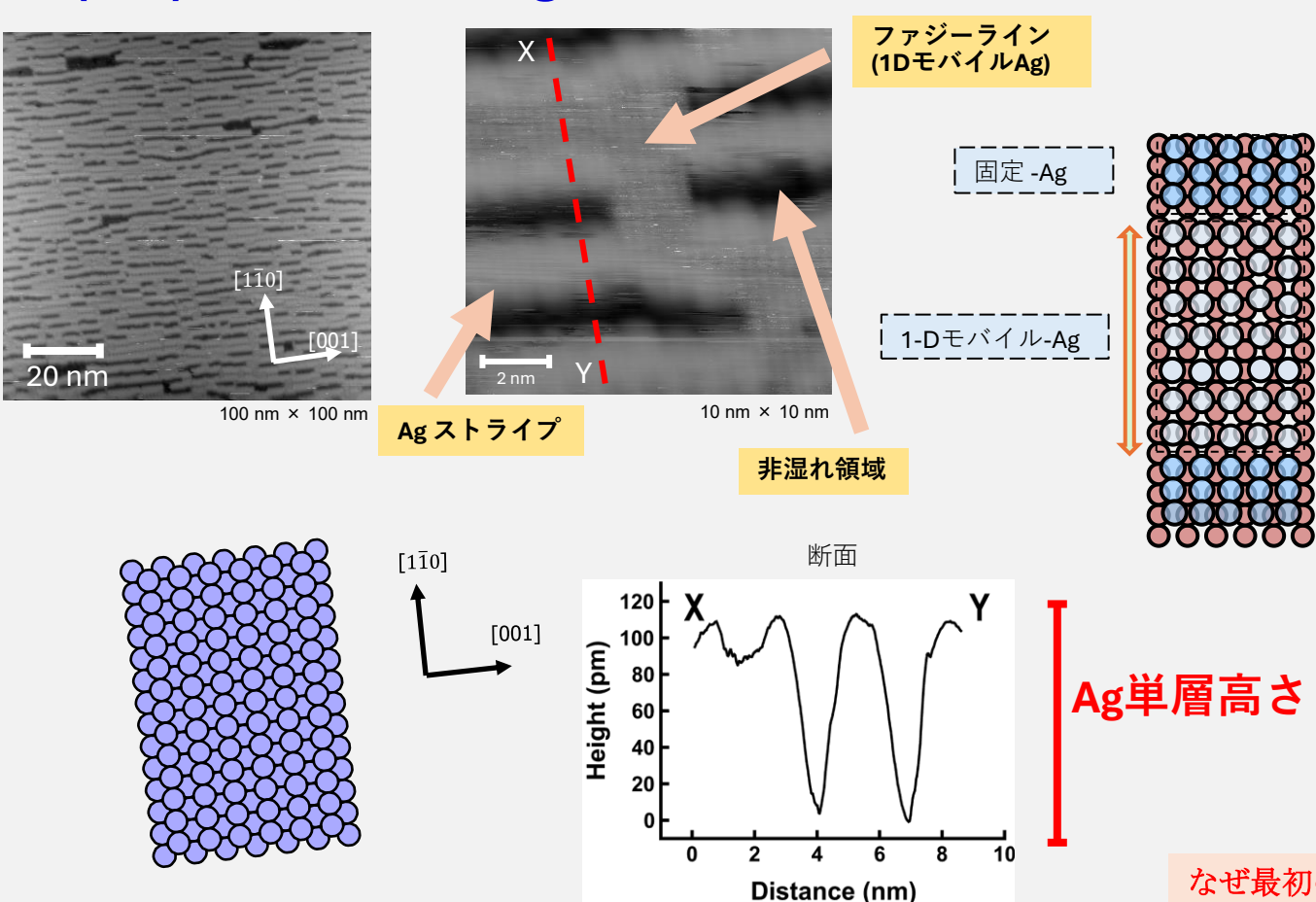


• シミュレーション
コード: VASP 5.3.3

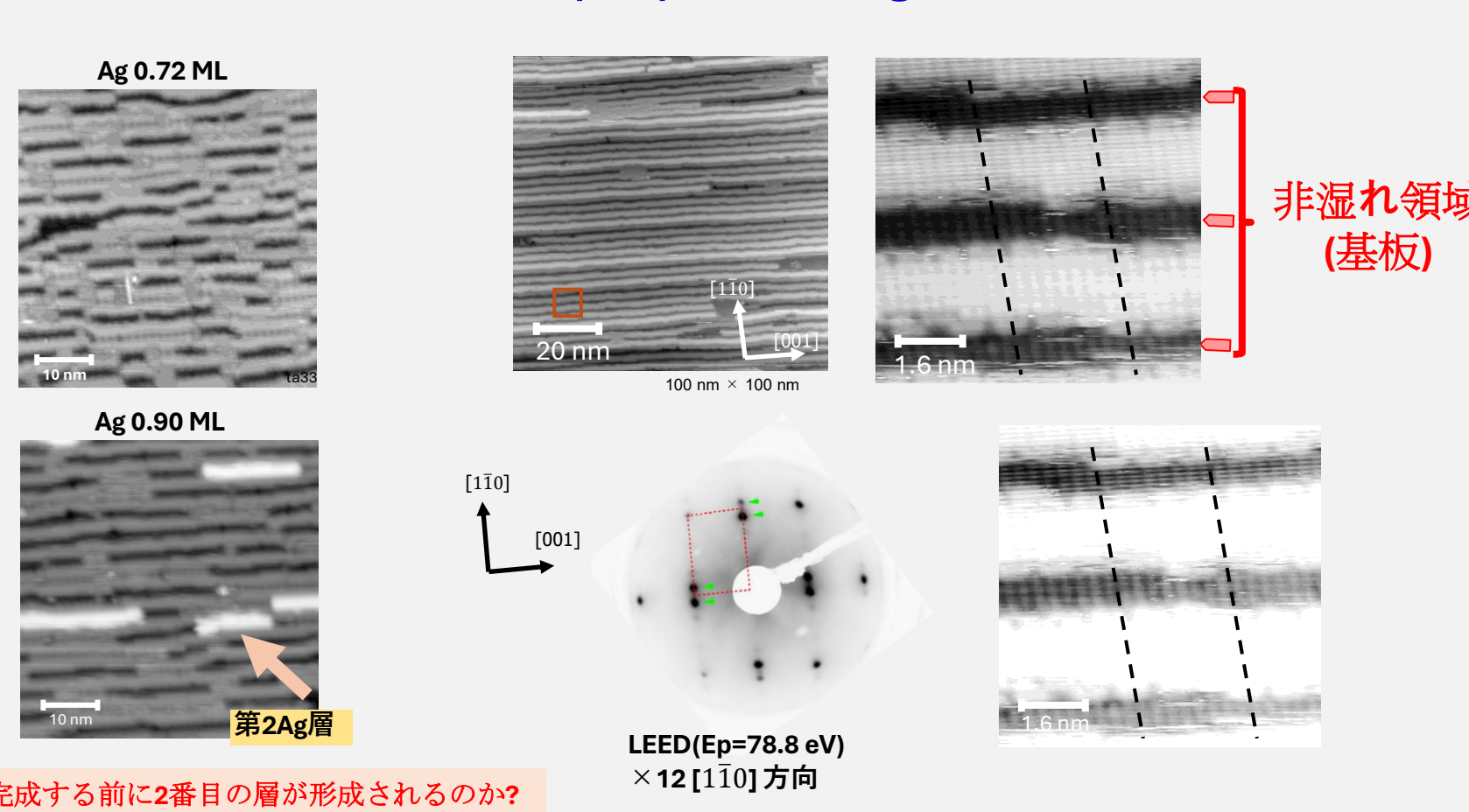


実験結果: STM, LEEDの観察

Ni(110) 0.72, 0.90 ML Ag @ RT

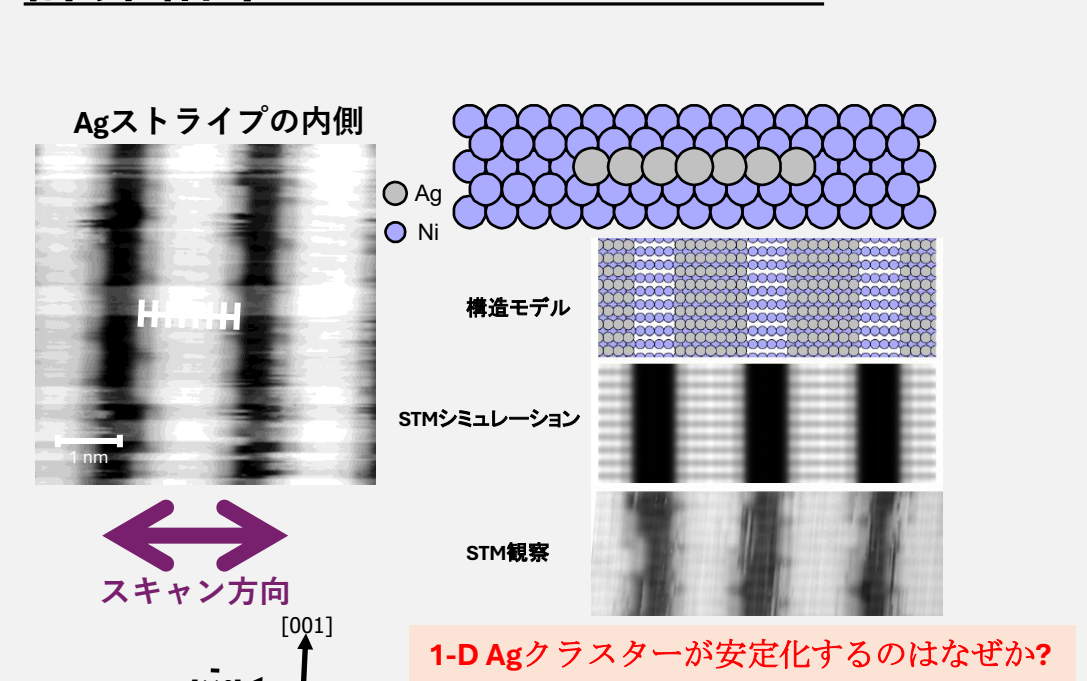


Ni(110) 0.74 ML-Ag @573K 10min

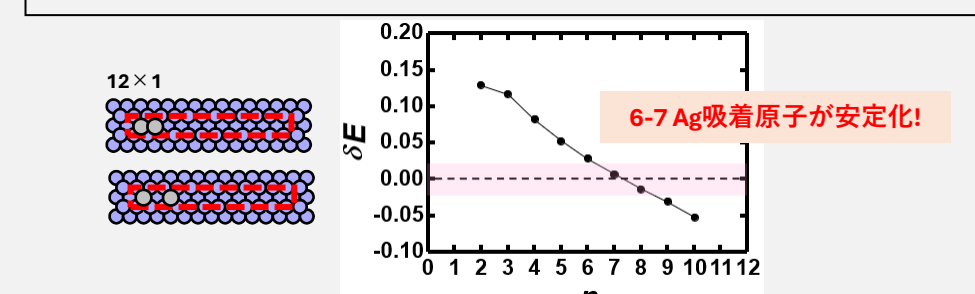


なぜ最初の層が完成する前に2番目の層が形成されるのか?

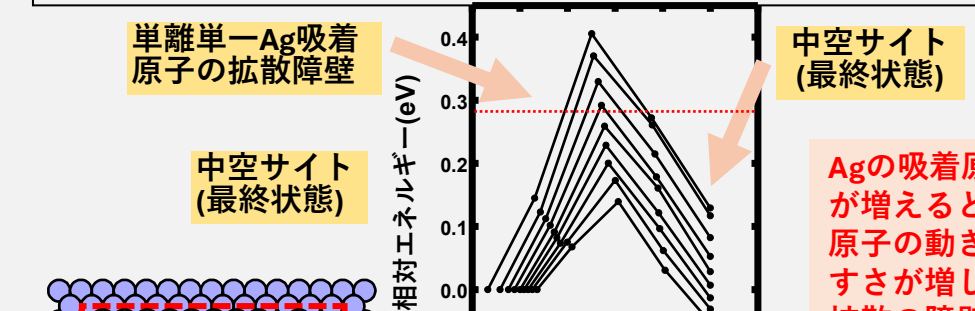
計算結果: シミュレーション



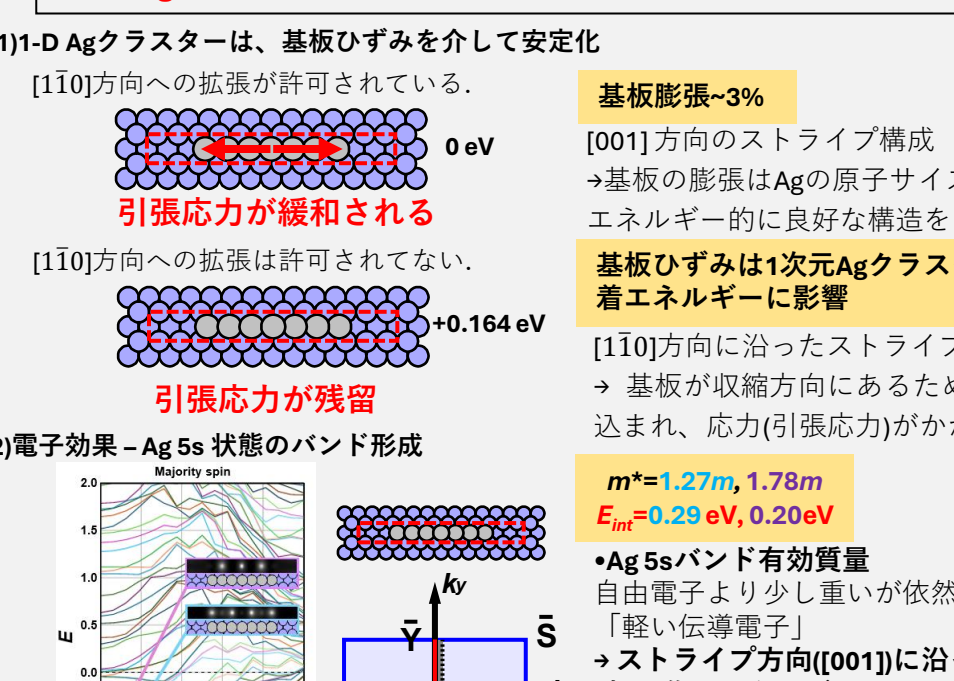
吸着エネルギーとエッジAg吸着原子運動の比較



エッジAg吸着原子の拡散障壁 (NEB法で計算)



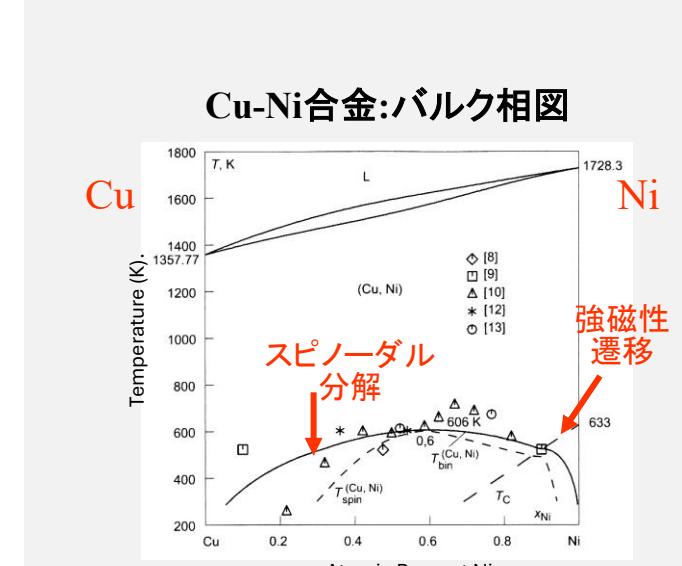
1次元Agクラスターが縞模様を形成するのはなぜか? 2つの可能性



研究対象の系2 (Cu-Ni系)

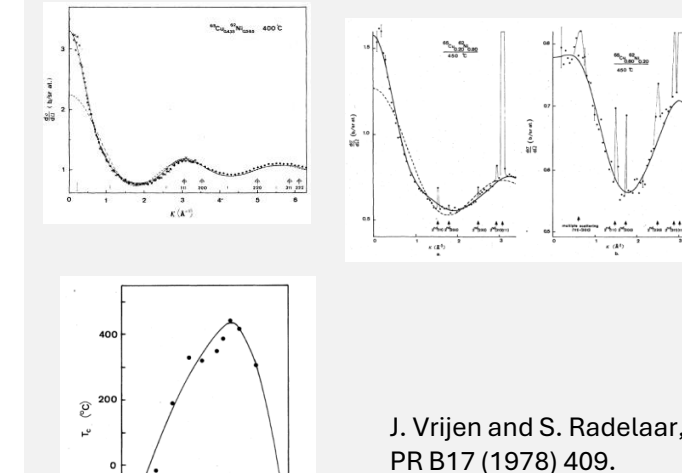
なぜNi/Cuなのか?

Cu-Ni系はバルクでは全率固溶体として知られるが、温度や組成によって原子が局所的に偏析することがある。



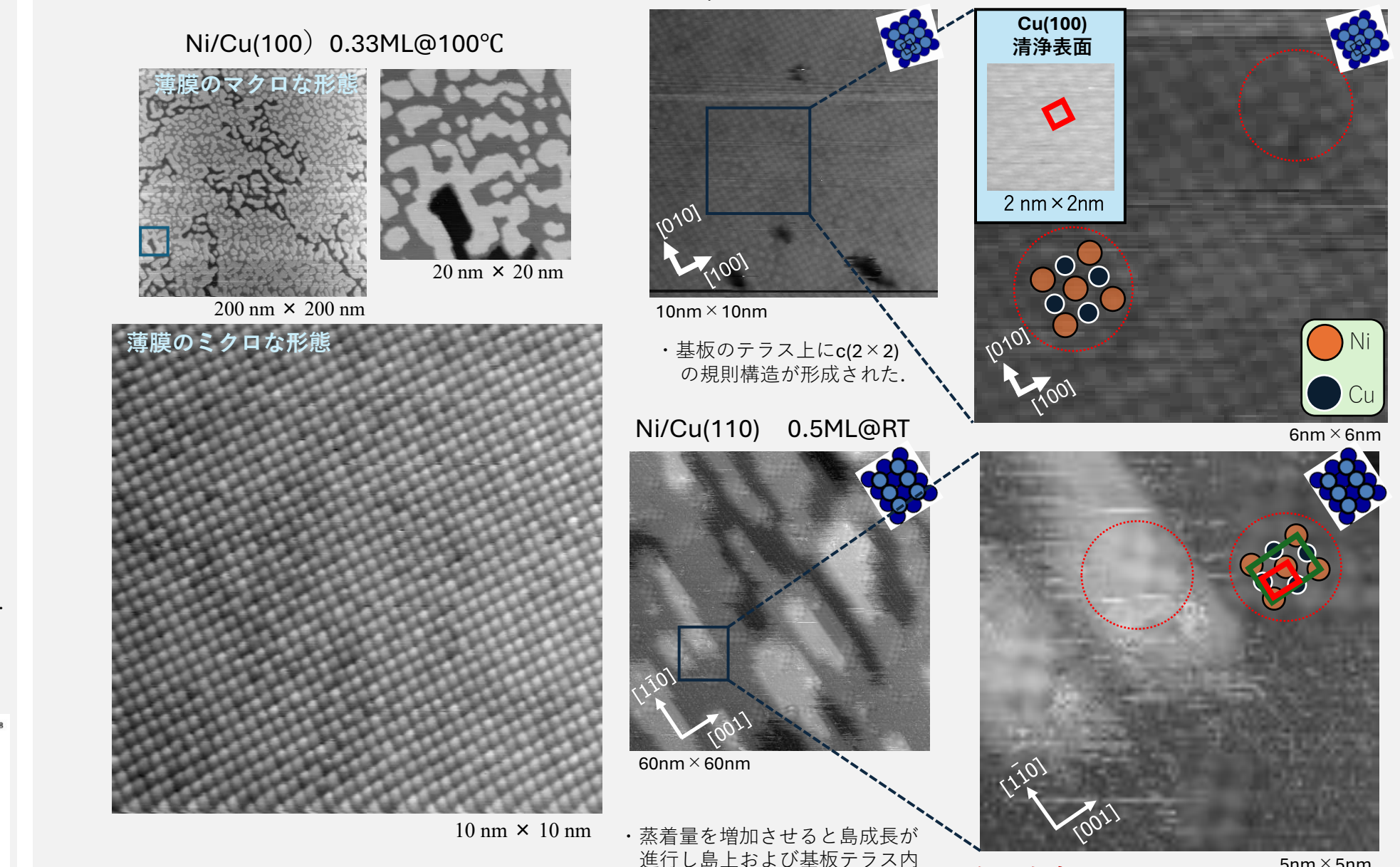
M.A. Turchanin, P.G. Agraval, and A.R. Abdulov, Powder Metallurgy and Metal Ceramics, 46 (2007) 467.

Clustering in Cu-Ni alloys: A diffuse neutron-scattering study
J. Vrijen, National Energy Research Foundation (NRF), Korea, The Netherlands
B. Radelaar, Philips Laboratory, Eindhoven University of Technology, The Netherlands
Clustering in Cu-Ni was studied from the diffuse scattering of thermal neutrons, using the special neutrons ³He and ⁴He as the scattering neutrons. Both the temperature and the composition dependence of clustering have been studied systematically. Alloys with composition ranging from 20 to 80 at.% Ni were investigated in equilibrium at temperatures between 400 and 900 K. The cluster composition is a strong function of temperature. The cluster composition is also a function of composition. The results show that many particle interactions play an important role in determining the amount of clustering in Cu-Ni. The limits of the metastability gap is indicated.

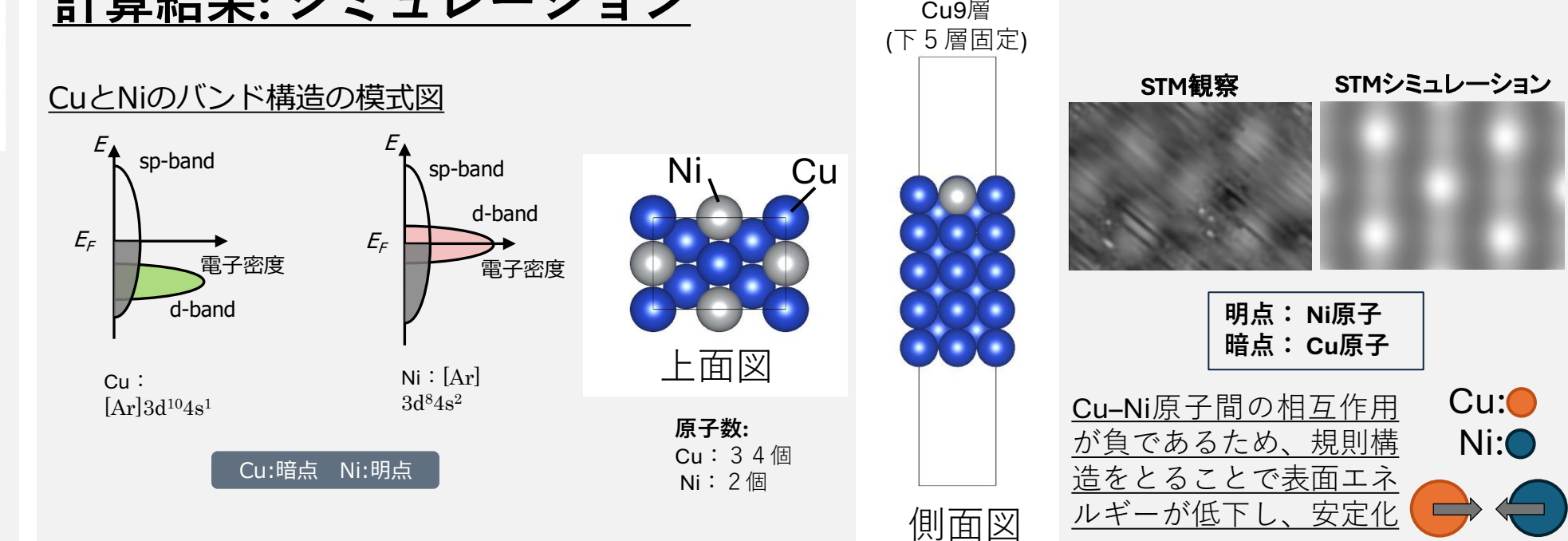


J. Vrijen and S. Radelaar, PR B17 (1978) 409.

実験結果: STMの観察



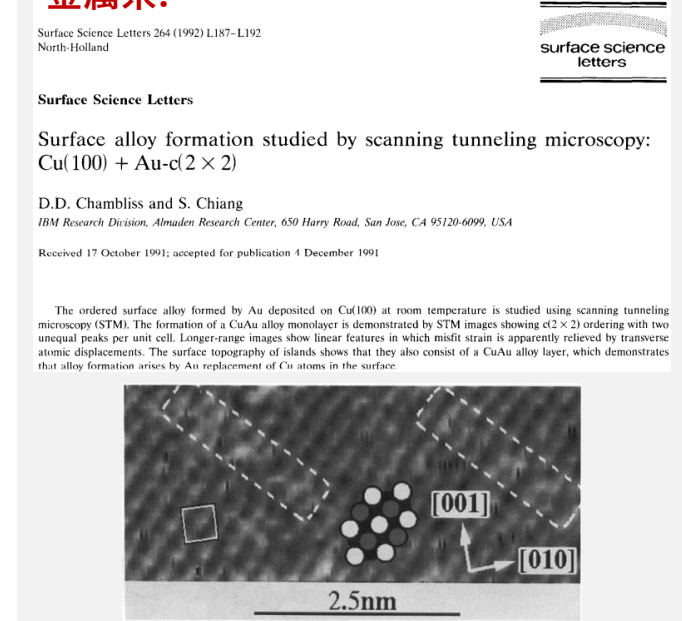
計算結果: シミュレーション



研究対象の系3 (Cu-Au系)

なぜAu/Cuなのか?

Au/Cu系は合金化が起こる代表的な金属系。



Ref: D.D. Chambliss and S. Chiang, Surf. Sci. Lett. 264 (1992) L187-L192.

計算結果

