

表面トラップ効果を考慮した PDP 用電極保護膜の 二次電子放出係数評価方法開発

○芹澤和実¹, 大沼宏彰¹, 菊地宏美², 末貞和真², 北垣昌規², 山下格¹, 鈴木愛³,
坪井秀行¹, 畠山望¹, 遠藤明¹, 高羽洋充¹, 久保百司¹, 梶山博司², 宮本明^{1,3}

¹ 東北大学大学院工学研究科(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-1302/701)

² 広島大学大学院先端物質科学研究科(〒739-8530 東広島市鏡山 1-3-1)

³ 東北大学未来科学技術共同研究センター(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-10)

【緒言】 プラズマディスプレイのさらなる低消費電力化に向けて、特に Xe^+ に対し二次電子放出係数(γ 値)の高い電極保護膜の開発が求められる。これまで著者らは、理論的な保護膜設計指針の提言に向けて、量子論に基づく γ 値予測シミュレータを開発してきた[1,2]。その結果 Xe^+ の定量的 γ 値算出のために、表面トラップ電子の取扱いを精密化する必要性を見出した。そこで新規 γ 値算出方法として、従来加味していなかった、非放出電子のトラップによるイオン中和エネルギー保存、および軌道の局在性に基づく価電子とは異なるイオン中和効率の2点を加味した。

【計算方法】 表面モデルの作成には古典分子動力学計算プログラム NEW-RYUDO、水の解離吸着にはグラントカノニカルモンテカルロ計算プログラム MONTA、表面の電子状態計算には量子化学計算プログラム New-Colors を用いた。量子化学計算で得た表面電子状態と(1)式[3]を用いて γ 値を求めた。

$$\gamma = \frac{\int_{\text{MAX}\{0, \varepsilon_{\min}\}}^{\varepsilon_{\max}} P_e(\varepsilon) \rho_{\text{unocc}}(\varepsilon) T(\varepsilon) d\varepsilon}{\int_{\text{MAX}\{\varepsilon_{\text{unocc}}^{\text{bottom}}, \varepsilon_{\min}\}}^{\varepsilon_{\max}} \rho_{\text{unocc}}(\varepsilon) T(\varepsilon) d\varepsilon} \quad (1)$$

ここで ε は電子のエネルギー、 ρ_{unocc} は表面の非占有準位のエネルギー分布、 P_e は電子の表面からの離脱確率である。また T は励起電子のエネルギー分布を表し、表面の電子エネルギー分布に依存する。新規手法では T をトラップ効率の関数とすることで、二次電子放出過程における表面のトラップ電子密度を定量的に精密化しながら γ 値を算出した。また BULK 価電子帯上端の軌道との酸素欠陥準位の局在性の違いから、トラップ準位の電子は価電子と比較しイオン中和効率が300倍高いと予測された。

【結果と考察】 NEW-RYUDO を用いて理想的に平坦な(111)、および<111>成長した清浄 MgO 表面モデルを構築した。さらに MONTA を用いて、表面 1 nm^2 あたりに2分子の水を解離吸着させ、水吸着凹凸表面を得た。水の OH は最表面の低配位 Mg 原子、また H は低配位 O 原子付近に吸着した。これらの MgO 表面の電子状態を New-Colors を用いて求めた。平坦表面と凹凸表面とを比較すると、凹凸表面にはラフネスに由来する電子トラップ準位が BULK の伝導帯下端に幅広く現れた。また凹凸表面においては水吸着により表面 OH に由来する価電子帯より低エネルギーな電子の存在が確認された。得られた電子状態から(1)を用いて表面の電子トラップ効率 0.3% に対する γ 値を算出した。図1に新規および従来法で算出された Xe^+ の γ 値を示す。図1のように、いずれもトラップ準位のない平坦表面で γ 値は0であった。しかし実際の表面構造に近いと考えられる凹凸表面では、実験報告値 0.038~0.054[4]を定量的に再現した。同時に水吸着による γ 値の低下も示した。これは表面 OH に由来する低エネルギー電子が二次電子放出に関与するためである。以上のように、 Xe^+ 中和に伴う二次電子放出過程において、表面トラップ電子の扱いを精密化することで、定量的な γ 値の算出に成功した。

【文献】 [1] K. Serizawa et al., *Jpn. J. Appl. Phys.*, **48**, (2009) 04C145. [2] K. Serizawa et al., *Proc. IDW'08*, (2008) 1861. [3] Y. Motoyama et al., *Jpn. J. Appl. Phys.*, **95**, (2004) 8419. [4] H. Kajiyama et al., *Proc. IMID'08*, (2008) 1613.

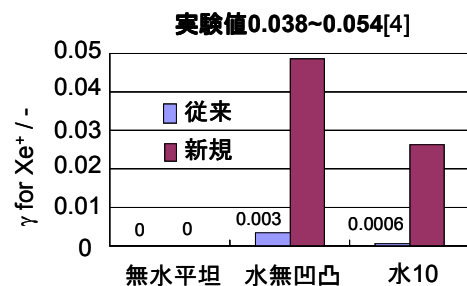


図1 量子論に基づき算出された各表面の γ 値：水吸着無平坦，水吸着無凹凸，水10分子吸着凹凸表面