

課題名 (タイトル) :

絶縁体超薄膜を蒸着した金属基板の誘電特性の解明

利用者氏名 : ○三輪 邦之\*  
理研での所属研究室名 : \*Kim 表面界面科学研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

絶縁体薄膜を蒸着した金属表面の誘電特性は、ナノ物性の解明といった基礎科学的側面に加え、種々の電子・光デバイスや不均一触媒に用いる新奇材料の開発という産業応用の側面からも盛んに調べられている。近年は絶縁体超薄膜の厚さを数原子スケールで制御可能な薄膜作製技術が確立されつつあり、それらの構造や物性を調べる理論的および実験的研究は、急速な発展が始まりつつある揺籃期にある。特に、上記のような、数原子層レベルの空間スケールの物質に関して、その特性を理解するためには、量子力学に基づく微視的な立場から構造や物性を調べる理論研究の推進が肝要である。本研究では、薄膜の厚さを変化させることで、(1) 孤立した「絶縁体超薄膜」の物性、および、(2) 金属基板を含めた「絶縁体超薄膜蒸着金属表面系」の物性、を制御可能であることに着目し、これらの系の構造や物性を密度汎関数理論 (DFT) に基づく第一原理計算を用いて解明することを目的とする。具体的には、広いバンドギャップを持つ絶縁体である NaCl の超薄膜を、Au などの貴金属表面に蒸着した系を取り扱う。

2. 具体的な利用内容、計算方法

清浄 Au(111)表面、および、NaCl の 1, 2, 3, 4 原子層の超薄膜が蒸着された Au(111)表面について、電子構造および誘電特性を調べた。Quantum ESPRESSO コードを使用して、平面波展開およびウルトラソフト擬ポテンシャル法を用いた DFT 計算を行った。ここでは特に、系に有限の電圧が印加された系の電子状態計算を行うため、有効遮蔽媒質 (ESM) 法 [M. Otani and O. Sugino, PRB 73, 115407 (2006).] を援用した。

3. 結果

今年度は、NaCl/Au(111) 表面の電圧印加下での電子状態および誘電率の計算を行った。有限電圧下での構造最適化計算を行い、誘電特性の解析を行った結果、NaCl の膜厚が 1, 2, 3, 4 原子層と増加するに従って NaCl 薄膜の誘電率が小さくなっていくことがわかった。Free standing の NaCl 薄膜の誘電率との比較から、現在、これらの起源を解析中である。

4. まとめ

清浄 Au(111) 表面および 1-4 原子層の NaCl 超薄膜が吸着した Au(111) 表面の誘電特性を、DFT 計算により解析した。薄膜の誘電特性における金属基板の影響を現在解析中である。また近年、NaCl 薄膜を蒸着した Au および Ag 表面に分子を蒸着した系の電気伝導特性および光学特性を調べた実験が行われており、その結果を解釈する際、本研究課題で得られた知見が有用であると考えられる。

5. 今後の計画・展望

系に有限電圧が印加された場合の電子状態計算をさらに推進する。NaCl/Au の表面に分子が蒸着した系や、計算対象をグラフェンや二硫化モリブデンといった 2 次元物質が吸着した固体表面等にも拡張し、物性解析を行う予定である。