

表面吸着分子系の物性解析

理化学研究所 Kim 表面界面科学研究室
三輪邦之

固体表面と分子の間に働く相互作用やこれらの間の電荷・エネルギーの移動を調べることは、表面物性や化学反応の素過程の解明といった基礎科学的観点に加え、分子デバイスや不均一触媒の新規材料開発といった応用的観点からも重要である。Kim 研究室では、走査トンネル顕微鏡を用いて固体表面に吸着した単一分子や分子膜の構造および電子状態を、サブナノメートルの高い空間分解能で調べている。これらナノ領域の表面系の原子構造や電子状態を理論的に調べる上では、量子力学の枠内で電子や原子核の微視的な振る舞いを解析することが肝要となる。2015年度のプロジェクトでは、HOKUSAI および RICC のスーパーコンピュータ・システムを用い、第一原理電子状態計算や Green 関数法に基づく計算により、清浄金属表面に吸着した単一分子や分子膜の動的特性[1, 2]、磁性[3]、分子膜の成長[4, 5]、分子と金属ナノ構造の光学特性[6]、数原子層の絶縁体薄膜が吸着した金属表面の誘電特性やそこに吸着した分子の構造特性[7]を調べた。また、固体表面やそこに吸着したナノ構造の物性についても解析を行った[8-10]。本講演では、上記の成果のうち、絶縁体薄膜蒸着金属表面の誘電特性およびそこに吸着した分子の構造特性や電子特性を調べた結果について発表する。また、分子の光学特性や磁性、表面での電子・原子ダイナミクスの解明に向けた研究の展望について発表する。

- [1] E. Kazuma *et al.*, *J. Phys. Chem. Lett.* **6**, 4239 (2015).
- [2] Z. Liang *et al.*, *ACS Nano* **9**, 8303 (2015).
- [3] E. Minamitani *et al.*, *Phys. Rev. B* **92**, 075144 (2015).
- [4] J.-H. Kim *et al.*, *Nat. Commun.* **7**, 10653 (2016).
- [5] Y. H. Song *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **55**, 2007 (2016).
- [6] K. Miwa *et al.*, *e-J. Surf. Sci. Nanotech.* **13**, 385 (2015).
- [7] K. Miwa *et al.*, *Phys. Rev. B* **93**, 165419 (2016).
- [8] H. Imada *et al.*, *Nanotechnology* **26**, 365402 (2015).
- [9] E. Minamitani *et al.*, *Phys. Rev. B* **93**, 085411 (2016).
- [10] K. Doi *et al.*, *Phys. Rev. B* **92**, 064421 (2015).