

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(1)

理研における所属研究室名:

(1)Kim 表面界面科学研究室

- |  |  |
|--|--|
| <p>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</p> <p>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。</p> <p>2. 具体的な利用内容、計算方法</p> <p>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。</p> | <p>3. 結果</p> <p>昨年度に引き続き、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。有限の電圧を印加した場合での構造最適化計算を行い、誘電特性の解析を行った。NaCl の膜厚が増加するに従って、NaCl 薄膜の誘電率が小さくなることがわかったため、その機構を詳しく解析するために、金属表面上の NaCl 薄膜および free standing の NaCl 薄膜の誘電率を調べた。また、有限電圧下での射影電子状態密度(PDOS)を解析したところ、表面近傍に局在する電子状態が現れることが示唆され、これは、Gundlach oscillation states と呼ばれる電子状態に対応すると考えられる。解析の結果、Gundlach oscillation states のエネルギー準位の決定には、NaCl 薄膜と真空領域での静電ポテンシャルの分布が重要であることを示唆する結果を得た。近年、NaCl/Au(111)の STM 観察を行った実験研究[Miyabi Imai-Imada et al., Phys. Rev. B 98 (2018) 201403(R)]において、Gundlach oscillation states の固有エネルギーが調べられているので、それらとの対応を踏まえ、解析を進めている。</p> <p>4. まとめ</p> <p>Au(111)表面上の 1-4 原子層の NaCl 超薄膜の誘電特性を、DFT 計算により解析した。ESM 法を援用し、系に有限電圧が印加された際の誘電応答における、NaCl 超薄膜の膜厚変化の影響を調べた。また電圧印加時に観測される、特徴的な表面状態について、そのエネルギー位置が決める要因を解析した。</p> <p>5. 今後の計画・展望</p> <p>Gundlach oscillation states の STM 観測は、基板の仕事関数を決める際にしばしば利用される。正常金属表面においては、Gundlach oscillation states のエネルギー準位 <math>E_n</math> と仕事関数の関係が理解されており、試料表面の局所的な仕事関数を調べるため等に</p> |
|--|--|

用いられている[C. L. Lin et al., Phys. Rev. Lett. 99 (2007) 216103]。しかし、NaCl 薄膜のような絶縁体薄膜が蒸着された金属表面においてはそれらの関係が非自明であり、特に本研究にて、NaCl 超薄膜の誘電応答が  $E_n$  に影響することを示す結果が得られたため、清浄金属表面で用いられるような単純な解析から基板の仕事関数は求められないことが示唆される。今後、 $E_n$  と仕事関数の対応関係を明らかにする予定である。