

二次元材料端部における電子状態と ELNES の第一原理解析
First-Principles Study of Electronic Structure and ELNES at Edges of Two-Dimensional
Materials

大阪大学産業科学研究所
産業科学ナノテクノロジーセンター
ナノ構造・機能評価研究分野
岩清水 千咲

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、第一原理計算コード WIEN2k を用いた電子状態解析により、二次元材料の端部における電子構造および電子励起特性の解明を目的とした。特に、電子エネルギー損失近傍構造 (ELNES) および状態密度 (DOS) のシミュレーションを実施し、局所的な電子状態の変化を詳細に評価した。

対象とした系は二次元材料の端部構造であり、周期境界条件を前提とする WIEN2k を適用するため、スーパーセルモデルを構築した。具体的には、z 軸方向に約 1 nm の真空層を導入することで層間相互作用を遮断し、さらに x 方向にも約 1 nm の空間を設けることで端部の孤立性を確保した。このようなモデル化により、実際の非周期的な端構造を近似的に再現した。

加えて、コアホール効果を考慮した計算を行い、内殻電子励起に伴う電子状態の変化を取り入れた ELNES スペクトルを取得した。その結果、コアホールの有無によってスペクトル形状に顕著な差異が生じることが確認され、実験スペクトルとの比較において重要な要素であることが示唆された。

これらの計算結果は実験データと定量的に比較され、端部特有の電子状態やスペクトル特徴の起源について一貫した解釈が得られつつある。現在、計算および実験結果を統合した形での論文投稿に向けた準備を進めている。