

## 原子吸着金属における電荷密度波の第一原理計算

(東大院工) ○大戸達彦・野島彰紘・神坂英幸・中村恒夫・牛山浩・山下晃一

電荷密度波の発生が示唆されている原子吸着金属表面に対して第一原理計算を行い、電荷密度波発生の機構を検証した。その結果、特定の金属が Cu(001) 基盤に吸着することにより、バルクバンドギャップの端を構成するバンドのエネルギーがわずかに低下することがわかった。エネルギーの低下したバンドは全体としてバルクの性質を持つが、フェルミエネルギー付近でバンドギャップ内に押し出されて表面状態の性質を持つ。このバンドによるフェルミ面はよくネスティングし、フェルミ波数は実験の値とよく一致した。

これまで電荷密度波の形成は低次元導体を土台に研究されてきた。低次元導体は異方性を持ち、電子・格子相互作用が強い。こうした系ではパイエルス転移と呼ばれる金属-絶縁体転移とそれに伴う電荷密度波の発生が見られ、その発生メカニズムに関して多くの研究がなされてきた。一方金属表面においても電荷密度波の発生を裏付けるような証拠が発見されており、事例としては In/Cu(001)0.5ML 表面における、温度による構造相転移が挙げられる [1]。

可逆に転移する関係にある二つの層の STM 像を図 1 に示す。図 1(b) が  $(9\sqrt{2} \times 2\sqrt{2})R45^\circ$  のパターンであり、これが 360K 以上で  $c(2 \times 2)$  構造に変化する。図 1(a) は 420K で得られた STM 像である。光電子分光によって、低温相の構造ではパイエルス転移に由来すると考えられるバンドギャップが観測された。そのバンドギャップを形成するバンドが高温相で作るフェルミ面はよくネスティングしており、相転移は電荷密度波によって引き起こされていることが確かめられた。

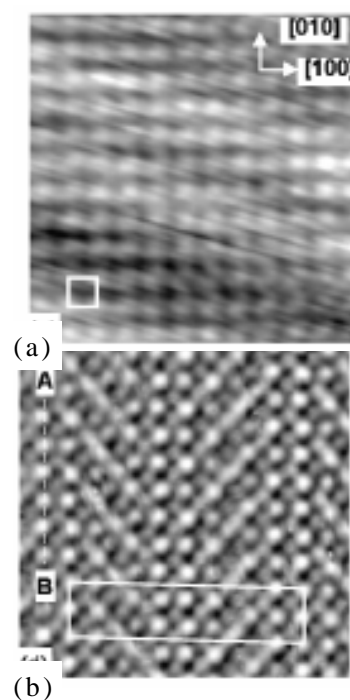


図 1  
In/Cu(001)0.5ML における STM 像 [1]。  
(a)  $c(2 \times 2)$  パターン  
(b)  $(9\sqrt{2} \times 2\sqrt{2})R45^\circ$  パターン

In/Cu(001)だけでなく Sn/Cu(001) ( $c(2 \times 2) \Leftrightarrow (3\sqrt{2} \times \sqrt{2})R45^\circ$ ) や Pb/Cu(001) ( $c(2 \times 2) \Leftrightarrow c(5\sqrt{2} \times \sqrt{2})R45^\circ$ ) 表面の相転移でも電荷密度波の発生が確認された[2][3]。実験研究から、これらの系に対してある程度共通な電荷密度波発生機構が提唱されている。光電子分光により観測されたバンドは、吸着原子との相互作用により Cu(001)のバルクバンドギャップから分枝した表面共鳴状態である。バルクバンドギャップの端とほとんど同じ分散関係を持つため、基盤 Cu(001)が特定の吸着原子についてフェルミ面のネスティングを引き起こすという機構が提唱された[3]。

In/Cu(001)、Pb/Cu(001)について、電荷密度波転移が実験で観測されている被覆率において第一原理計算を行った結果、以下のようなことが明らかになった。まず、Cu(001)基盤に In、Pb 原子が吸着すると、ポテンシャルの変化によりバルクバンドのエネルギーが低下する。このバルクバンドは投影バルクバンドの端を形成しているため、エネルギーが低下するとバルクバンドギャップ内に押し出され、k 空間の一部で表面付近に電荷密度の振幅を持つようになる。しかし本来はバルクに由来するバンドであるため、分散関係がバルクのバンドとほとんど変わらない。以上のような特徴と波動関数の解析とから、このバンドは In/Cu(001)、Pb/Cu(001)、において光電子分光により観測された表面共鳴状態 S と同一であるということが言える。このバンド S によるフェルミ面は確かにバルクバンドギャップの端と同じ分散関係を示し、計算されたフェルミ波数は実験で測定された値と非常によく一致した。これらの結果から、バルクバンドから分岐する共鳴状態によってフェルミ面のネスティングが起こり、 $c(2 \times 2)$ の吸着構造が電荷密度波転移によって修正を受けるという機構が理論計算によって裏付けられた。生成されるフェルミ面はバルクバンドギャップの形状に強く依存するため、基盤 Cu(001)がパリエルス転移を引き起こすという主張を支持している。さらに X.Gao らによる計算[4]で表面共鳴状態として考えられていたバンドは吸着原子由来のものであり、実験で観測されたものとは異なることも明らかになった。

実験と一致するフェルミ波数が計算で再現されたのは初めてのことであるが、ここまでの計算では相転移前の電子状態についてしか議論できていない。現象をよりよく理解するため、ヤーン・テラー効果を用いた議論[5]をこの系に適用することを試みた。発表当日には、格子のひずみを秩序パラメータとした相転移の取り扱いについても議論する予定である。

[1]T.Nakagawa et al.Phys.Rev.Lett**86**(2001)854

[2]J.Martinez-Blanco,et al.Phys.Rev.B**72**(2005)041401(R)

[3]V.Joco,et al.Surf.Sci**600**(2006)3851

[4]X.Gao,et al.Phys.Rev.B**66**(2002)073405

[5]I.B.Bersuker “The Jahn-Teller Effect” (2006)CAMBRIDGE