Graphene-Insulator-Semiconductor 電子源の電子放出特性のシミュレーション Simulation of Field-Emission Property of Graphene-Insulator-Semiconductor Electron Source 阪大基礎工¹,産総研²:[○]若家 冨士男¹, (B) 寺門 大地¹,阿保 智¹,長尾 昌善²,村上 勝久² Osaka Univ.¹, AIST²: [○]F. Wakaya¹, D. Terakado¹, S. Abo¹, M. Nagao², K. Murakami² E-mail: wakaya.f.es@osaka-u.ac.jp

Graphene-Insulator-Semiconductor (GIS)構造に 10 V 程度の電圧を印加したときに Graphene 表面 から真空中に放出される電子を利用する平面型電子源は,これまでの Metal-Oxide-Semiconductor 構造の電子源に比べて桁違いに大きな放出効率を示し,注目を集めている [1,2]。本研究では,GIS 構造電子源の電子放出特性のメカニズムを解明し,さらなる効率向上や電流密度の増大に向けた 指針を得ることを目的としている。

今回は、最表面の Graphene 層に注目し、10 eV 程度のエネルギーを持つ電子の波束を入射した ときの透過・反射・非弾性散乱についてシミュレーションした。図 1(a)(b) に計算領域の模式図と *x-y* 面内の単位胞を示す。 $z = L_z/2$ の場所に Graphene 薄膜を置き、その他は真空とした。また、 $L_x = 4.26$ Å, $L_y = 2.46$ Å, $L_z = 201$ Å とし、*x* 方向と*y* 方向は周期境界とし、*z* 方向は吸収ポテ ンシャルを置くことにより無反射境界とした。この空間に約 0.15 Å 間隔のメッシュ点をとって波 束の時間発展を計算した。図 1(c) には第一原理計算により求めた Graphene の電子密度分布を示 す (*z* 座標は C 原子の位置)。この電子密度から求められる散乱ポテンシャルに電子の波束が入射 したときの波束の時間発展を Schrödinger 方程式を数値的に解くことにより求めた。例えば、単層 Graphene に 10 eV の電子の波束を入射し、非弾性散乱を無視すると、透過率が 85.4 % (反射率が 14.6 %) となった。Graphene の層数 (膜厚) を変えたときや非弾性散乱を取り入れたときの結果を 当日報告する。

【謝辞】 第一原理計算 (局所密度近似の密度汎関数法) には Quantum Espresso[3] を利用した。

- 1. K. Murakami et al., Appl. Phys. Lett. 114 (2019) 213501.
- 2. K. Murakami et al., ACS Appl. Electron. Mater. 2 (2020) 2265.
- 3. P. Giannozzi et al., J. Phys. Cond. Matt. **21** (2009) 395502.



図 1: (a) 計算領域の形と記号の定義。(b) *x-y* 面内の単位胞 (中央の破線の部分)。(c) Graphene の電子密度分布。距離の単位は Bohr 半径 a_0 ,密度の単位は a_0^{-3} 。