

|              |                                                                                 |
|--------------|---------------------------------------------------------------------------------|
| Title        | 局在軌道表示を用いた層状物質系の電子状態の計算                                                         |
| Author(s)    | 藤田, 裕司                                                                          |
| Citation     |                                                                                 |
| Issue Date   | 2003-03                                                                         |
| Type         | Thesis or Dissertation                                                          |
| Text version | none                                                                            |
| URL          | <a href="http://hdl.handle.net/10119/3029">http://hdl.handle.net/10119/3029</a> |
| Rights       |                                                                                 |
| Description  | Supervisor:片山 信一, 材料科学研究科, 修士                                                   |

# 局在軌道表示を用いた層状物質系の電子状態の計算

藤田 裕司 (片山研究室)

[はじめに] 現在、次々に開発される新規ナノ材料では、局所的原子配位、表面、界面状態などが、その新奇物性の出現を促している。これら原子スケールにおける局所環境の影響を取り入れる電子状態計算方法の一つとしてリカージョン法を挙げることができる。

本研究ではこのリカージョン法を用い、微小熱伝導素子や高密度相変化型光メモリー材料として期待されるカルコゲン層状物質、特に  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  構造を持つ材料に注目し、各原子に関する局所状態密度 (LDOS) の計算を行うことを目的とする。まず、完全結晶を想定して局所状態密度の計算を行う。これにより不純物状態および非晶質状態に必要なパラメータを計算することが可能となる。本研究では結晶内の置換型欠陥による電子状態の変化を計算し、欠陥の局所的な影響を調べる。

[計算手法、結果] 強結合近似によるバンド計算を採用して、リカージョン法で使用する飛び移り積分を決定した。その際、最近接原子と第2近接原子の影響を考慮し、孤立原子において理論的に計算された項値、スピン軌道相互作用などを参考にして約  $0.14\text{eV}$  のギャップが出現するようにした。それを基にリカージョン法を用いて 17885 個の原子を考慮する近似の範囲で層状物質の局所状態密度の計算を行った。計算対象の層状物質として  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ 、 $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  を選んだ。置換型欠陥の計算は  $\text{Bi}_{\text{Te}^{(1)}}$ 、 $\text{Bi}_{\text{Te}^{(2)}}$ 、 $\text{Te}_{\text{Bi}}$  の場合を行った。

例として図 1 に  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  の局所状態密度の計算結果を示す。価電子帯の上端をエネルギーの基準 ( $0\text{eV}$ ) とした。なお、結晶内での対称性の違いにより、Te 原子を区別している ( $\text{Te}^{(1)}$ 、 $\text{Te}^{(2)}$ )。各図において左から数えて第 1、第 2 の大きいピークは各原子の s 軌道がつくる状態密度である。p 軌道は価電子状態、および伝導状態を形成している。 $0\text{eV}$  にある点線付近にバンドギャップがあるはずであるが、17885 個の原子を考慮する近似では、ギャップが現われなかった。価電子状態に注目すると、ギャップに近いバンド端では Te 原子の局所状態密度が大きいことがわかる。それとは対照的に Bi 原子の局所状態密度はギャップから離れている所の方が大きい。また  $\text{Te}^{(1)}$ 、 $\text{Te}^{(2)}$  の局所状態密度に多少の違いがあることが読み取れる。Bi 原子に注目すると、伝導帯の局所状態密度が大きく、価電子帯の局所状態密度が小さい。つまり基底状態において電子密度は Te 原子近傍が高く、Bi 原子近傍は低いことがわかる。

**Keywords** 強結合近似、局所状態密度、リカージョン法

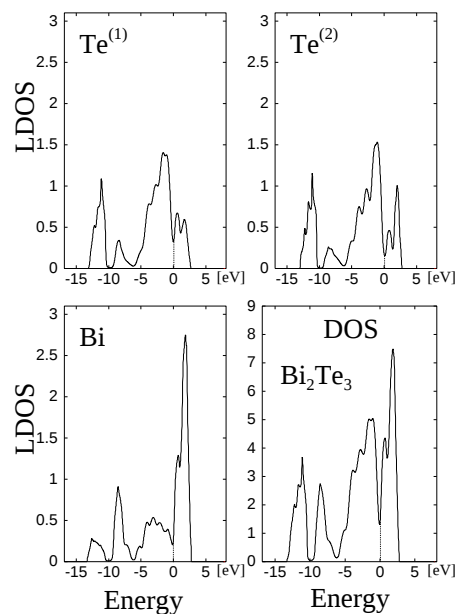


図 1:  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  における局所状態密度