

第一原理計算による Fe₃Si/Ge における界面構造と SBH 変調の関係

First Principles Study of the Relation between Schottky-barrier Change and

Interface Structures at Fe₃Si/Ge Interfaces

千葉大理 °小日向 恭祐, 中山 隆史

Chiba Univ. °Kyosuke Kobinata, Takashi Nakayama

E-mail: kobinata@phys8.s.chiba-u.jp

最近、強磁性の Fe₃Si シリサイドを用いた Fe₃Si/Ge(111)界面において、界面の接触面積を小さくしていくと Fe₃Si のフェルミエネルギー位置は Ge の価電子帯近傍にピンニングせず上昇するという実験が報告された[1]。しかし、このエネルギー位置の上昇がなぜ起こっているのかは未だ明らかになっていない。そこで本研究では、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を用いて、様々な Fe₃Si/Ge(111)界面を形成し、界面の形成エネルギーとショットキーバリア高さ(SBH)を調べた。Fe₃Si(111)面には Fe 原子が界面に現れる構造が 3 種類、Si 原子が界面に現れる構造が 1 種類考えられる。今回はこれらを Fe₁, Fe₂, Fe₃, Si 面と呼ぶ。

Fig.1 は、化学ポテンシャル μ_{Ge} 、 μ_{Fe} の関数として、Fe₃Si/Ge(111)の 4 種類の界面の安定な領域を示した相図である。ここでは、Ge(111)界面は、ダングリングボンドが 1 本の α 面を用いている。化学ポテンシャルは Ge, Fe の供給量に対応し、赤い領域は Fe のバルクが相分離せず安定となる領域を示している。各界面を形成する際に、Si 原子は常にシリサイドに自由に供給・排除されると考え、ここでは μ_{Si} については考慮していない。図から明らかなように、バルク Ge と接して界面が安定に形成されていると考えられる赤領域の右端近辺では、Fe₃ 面が安定となる。Fe₃ 面は、界面に Fe 原子が現れるが、Ge のダングリングボンドの先には Si 原子が位置する構造であり、Ge-Si 間に共有結合が確認できた。図 2 は、Fe₃Si/Ge(111)の各界面における SBH の値である。最も安定と考えられる Fe₃ 面では、SBH が約 0.1[eV]となっており、他の界面よりも上昇している。発表ではこれらの詳細とともに、Ge(111)- β 面や界面に欠陥を形成した場合についても述べる。[1] K. Kasahara et al., *Phys. Rev. B*, **84**, 205301 (2011)

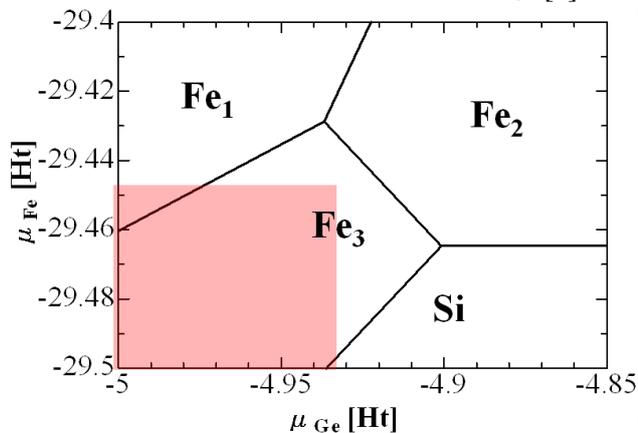


Fig.1 Phase diagram of stable Fe₃Si/Ge interface structure as functions of chemical potentials of Ge and Fe. The red region corresponds to the stable region against phase separation into Fe and Si.

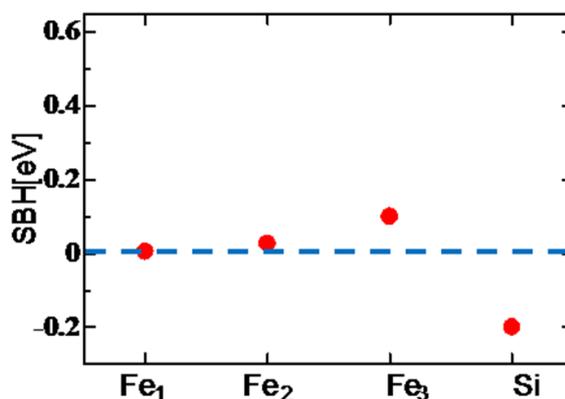


Fig.2 Calculated Schottky barrier height for hole carriers at four kinds of Fe₃Si/Ge(111) interfaces. Dotted line indicates the energy position of Ge valence-band top.