準粒子近似法による、格子歪を受けた Mg_2Si の電子状態計算

Quasi-particle first principle calculation of energy bands in distorted Mg_2Si

首都大 SD　稲葉 亜佑美, ○菅原 宏治

Dept. System Design, Tokyo Metropolitan University

Ayumi Inaba and Hiroharu Sugawara

E-mail: hsugawa@tmu.ac.jp

【背景】歪を受けた Mg_2Si において、熱電能が極めて向上する [1]、伝導型が変わる [2]などの特異な現象が報告されている。半導体のバンドギャップを正確に推定する準粒子近似第一原理計算を用いて、歪を受けた Mg_2Si の電子状態を計算し、これら発現機構の解明に迫る。

【手法・結果】準粒子自己無撞着 GW 近似 PMT 法による第一原理バンド計算コード "ecalj" [3] を用いて、立方晶および正方晶 Mg_2Si のバンド構造を計算した。電荷中性条件からフェルミエネルギーを定め、これをエネルギー原点としてバンド分散関係をプロットした。(左図)立方晶 (格子定数 a = 0.635nm)に対して、実験値と同等のバンドギャップの値 0.68eV が得られた [4]。(右図)結晶単位包体積を保ったまま、格子歪を加えて正方晶とした構造 (c=1.04a, a=b)では、価電子帯の縮退が解け、その頂上がフェルミエネルギーに接近した。この計算結果は、面内圧縮歪を受けた Mg_2Si において p 型伝導が得られる傾向を示唆する。

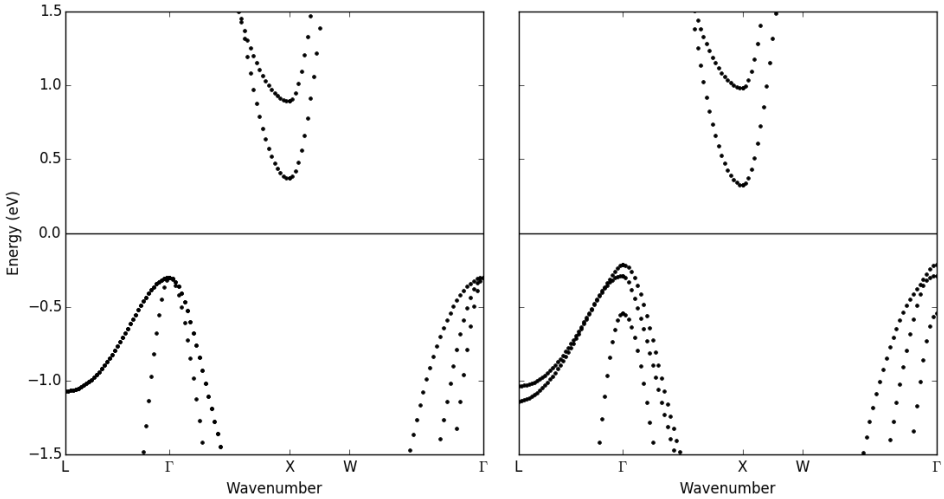

Fig. Calculated band diagram of cubic and distorted Mg_2Si

【文献】[1] K. Takarabe *et al.*, J. Appl. Phys. 115, 213705 (2014). [2] M. Kurokawa, K. Akiyama, H. Funakubo *et al.*, APAC-SILICIDE 2016, Fukuoka, (17-AM-IV-4). [3] T. Kotani, J. Phys. Soc. Jpn. 83, 094711 (2014). [4] A. Inaba, H. Sugawara, APAC-SILICIDE 2016, Fukuoka (17-P39)

【謝辞】 本計算の一部は、名古屋大学情報基盤センターFujitsu PRIMERGY CX400、および、東京大学情報基盤センターReedbush-U を用いて実行した。本研究は、科学研究費補助金 (課題番号16H02329)の助成を受けた。