第一原理計算を用いた $TlInS_2$ におけるドープによる電子状態解析

First-principles study of doping properties in 2D nano system $TlInS_2$

千葉大理 [1], 千葉工大工 [2], 大阪府大工 [3], アゼルバイジャン科学アカデミー[4]
○石川真人 [1], 中山隆史 [1], 脇田和樹 [2], 沈用球 [3], ナジム. マメドフ [4]
Chiba Univ[1], Chiba Inst of Tech[2], 3.Osaka Pref Univ[3], Azerbaijan National Academy of Sciences[4]
°M.Ishikawa[1], T.Nakayama[1] , K. Wakita [2] Y.G.Shim [3] N. Mamedov[4]
E-mail: masatoi4854@gmail.com

1. 背景

Tl 系化合物半導体は低次元の結晶構造を構成し、$TlInS_2$ は Tl 原子が 2 次元の層状構造を示す。構造解析実験の結果から低温では Incommensurate 相が存在することが報告され［1］、Fe をドープすると吸収スペクトルが上昇することから、機能性材料への応用が期待されている［2］。しかしドーピングのメカニズムを解明する理論的なアプローチはなされておらず、ドープ材料がどのようにバンド構造や光学特性に変化を与えているかは不明である。そこで我々は第一原理計算を用いてドーピングによる電子構造と光学特性のメカニズムについて解析を行った。

2. 結果および考察

計算で用いた $TlInS_2$ のモデルはバルク構造を拡張し 32 原子（Tl=8,In=8,S=16）とし、ドープの形式は構成原子を Fe に変更する置換型と結晶内に Fe 原子が注入される挿入型で行った。結果、置換型ではバンド構造が見られず、挿入型でバンド構造を確認した（図 1）。バルク状態の $TlInS_2$ のバンドギャップ内に Fe 原子の d 軌道が現れ、結晶場効果によって占有・非占有状態でエネルギー分裂（ΔE）が起きることが分かった。占有状態での電子状態は d 軌道と S 原子の p 軌道の Hybrid 状態を形成する。光学吸収スペクトルの計算結果ではバンド構造を反映して吸収端にピークが現れて実験結果を説明することを確認した。発表では Mn ドープについても報告する。

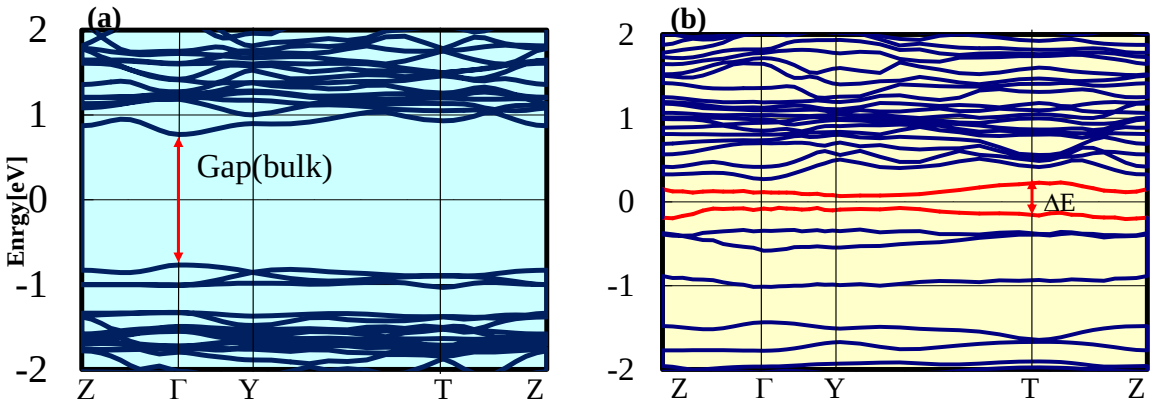

図 1. Incommensurate 相の TlInS2 のバンド構造 (a)バルク (b)Fe ドープ

[1]N. Mamedov et al, Phys.Status.Solidi **B 252**,1248 (2015).
[2]O. Alekperov, A. Nadjafov,Jpn.J. Appl. Phys.2011, 50, 05FC07