

SnS 薄膜の電子状態とラマン活性モードの層数依存性

Theoretic Study on Raman Active Modes of SnS Thin Films

関学大理工¹, インド科学教育研究大², 東大工³

○(M1)米盛 樹生¹, DUTTA Sudipta², 長汐 晃輔³, 若林 克法¹

Kwansei Gakuin Univ.¹, IISER Tirupati², Tokyo Univ.³

○Itsuki Yonemori¹, Sudipta Dutta², Kosuke Nagashio³, Katsunori Wakabayashi¹

硫化スズ (SnS) は豊富な資源として存在する元素から構成され、熱電及び太陽光発電材料として注目を集めている。SnS は層状の結晶構造を持つため、低い結晶密度を持ち、高い熱伝導率を示す。透明かつ柔軟なデバイスの作成には結晶の単層成長や結晶成長の層数制御が求められている。また、SnS 結晶は層数に依存して強誘電性を持つことも報告されており^[1]、結晶内部の層数の同定が求められている。ラマン分光法は結晶内部の層数解析に有用と考えられている。本研究では、第一原理計算を用いて振動モードを理論的に計算し、ラマン活性となる振動モードに注目することで結晶内部の層数の同定を行う。

図(a)に示すように、バルク構造の SnS は層間がファンデルワールス力で弱く結合している単純斜方格子を持つ結晶である。本研究では、一般化勾配近似(GGA-PBE)^[3]の下で、構造最適化と電子状態計算及びフォノンモードの計算を行った。数値計算には、VASP を使用した。図(b)に、バルク結晶のエネルギーバンド構造を示す。約 0.64 eV のエネルギーギャップを有する間接遷移型半導体となる。バルクと単層及び二層について、 Γ 点でのフォノン振動モード計算した結果が図(c)である。層数の減少に伴って出現する振動モードに変化が現れる。振動数の一番高いラマン活性モードに注目すると、層数の増加に伴って低い振動数で出現することがわかる。同様に、200 cm^{-1} 付近や 150 cm^{-1} 付近でも、単層構造より積層構造でのラマン活性モードの方が低い振動数で出現していることがわかる。一方で、100 cm^{-1} 付近のラマン活性モードは、層数が増えるに従ってラマン活性モードの出現位置が高い振動数に変化し、バルク構造では消滅することがわかる。このことより、ラマン活性モードの出現位置に注目することで SnS 結晶内部の層数の同定を行うことができると考えられる。

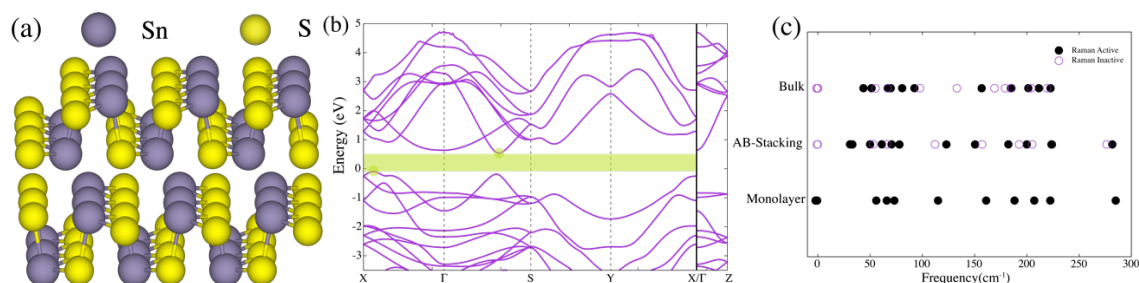


Figure (a) Crystal structure of bulk SnS. (b) Energy band structure for bulk SnS. (c) The phonon vibration mode for bulk, AB stacking bilayer and monolayer. Black (white) circles indicate Raman active (inactive) modes.

Reference

- [1] N. Higashitarumizu *et al.* (2019), under review.
- [2] G. Kresse and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B*, 54, 11169 (1996)
- [3] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* 77, 3865 (1996)