

Sb 系カルコゲナイドの広帯域光学特性の第一原理計算

Ab initio study on optical properties of Sb-based chalcogenides

産総研¹, ゲルツェン大², 慶應大理工³,

○牧野 孝太郎¹, 齊藤 雄太¹, A. V. Kolobov^{1,2}, P. Fons^{1,3}, 富永 淳二¹

AIST¹, Herzen State Pedagogical Univ.², Keio Univ.³

°K. Makino¹, Y. Saito¹, A. V. Kolobov^{1,2}, P. Fons^{1,3}, J. Tominaga¹

E-mail: k-makino@aist.go.jp

Ge-Sb-Te に代表されるカルコゲナイド相変化材料は、相変化に伴う光学特性の変化を利用し書き換え可能型の光ディスクに用いられてきた。近年ではディスプレイやメタマテリアル、光スイッチなど新たなフォトンクス応用が提案され、また応用対象とする波長域も可視光からテラヘルツ波帯まで拡大しつつある。このような背景のなか、対象とする波長や応用によって Ge-Sb-Te 以外の相変化材料がより優れた特性を示すことが報告されており[1]、高度に光を制御するためには用途に合わせた相変化材料を用いる必要がある。本研究では Sb 系のカルコゲナイド材料に着目し、第一原理により光学特性を評価した。

電子状態及び光学定数の計算には密度汎関数法に基づくシミュレーションパッケージである Vienna *Ab initio* Simulation Package (VASP)を使用した。相変化材料としてよく知られた Sb_2Te_3 、可視フォトンクス応用の観点から優れた特性が報告されている Sb_2S_3 [1]に加え、 Sb_2Se_3 を対象とし、いずれも結晶相を仮定した。得られた複素屈折率($n+ik$)スペクトルを Fig. 1 に示す。なお、複素屈折率は independent-particle approximation による方法で得られた複素誘電率から求めたものである。この結果より、 Sb_2S_3 は可視光から中赤外線領域にかけて比較的光吸収量が小さく、透明な領域も広いことが明らかとなった。特に赤外線に対しては吸収が小さいため、低損失が求められる応用に適していると考えられる。一方、 Sb_2Te_3 は吸収が比較的大きいものの、屈折率実部の値が大きいため大きな屈折率変化やデバイスの小型化が期待でき、 Sb_2Se_3 は中間的な特性を示すと予想される。

[1] W. Dong *et al.*, Adv. Funct. Mater. 29, 1806181 (2019).

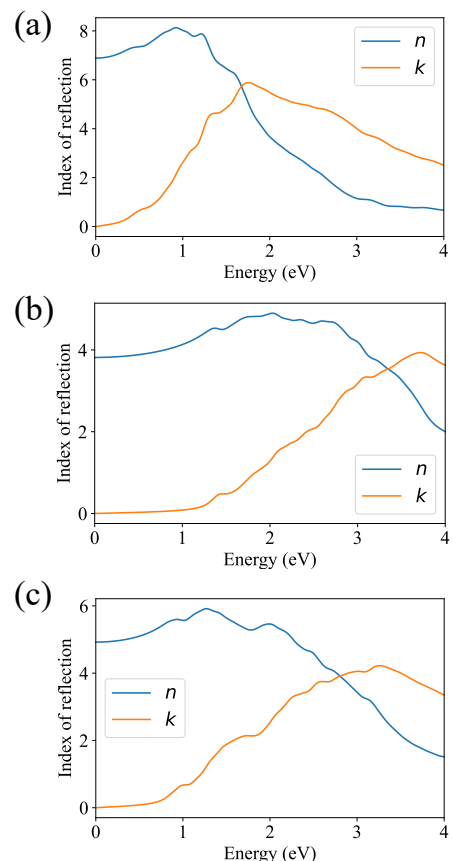


Fig. 1. Calculated index of reflection for crystalline Sb_2Te_3 (a), Sb_2S_3 (b), and Sb_2Se_3 (c).