

CoBHT の電子状態における歪み効果の理論的研究

Theoretical Studies of Strain Effect on Electronic States of CoBHT

関学大¹, 東北大 AIMR², NIMS³ ○(M1)西込 健人¹, 熊谷 明哉², 塚越 一仁³, 若林 克法¹

Kwansei Gakuin Univ.¹, Tohoku Univ AIMR.², NIMS.³,

○Kento Nishigomi¹, Akichika Kumatani², Kazuhito Tsukagoshi³, Katsunori Wakabayashi¹

E-mail: gxr59682@kwansei.ac.jp

ビス(ジチオレン)コバルト(II) (CoBHT)は、金属イオンと配位子によって構成された配位ナノシートである[1]。本研究では、Quantum Espresso を用いて CoBHT の電子状態及びその歪み効果を理論的に解析した。現在、CoBHT には高密度構造と低密度構造の二種類の結晶構造 (図(a)) が提案されている。これら二つの結晶構造に対して、電子状態の比較を行うとともに、歪み効果の相違点を明らかにする。

図(b)は、高密度結晶構造のエネルギーバンド図である。Co 原子に由来する磁気モーメントにより、スピン分極が生じている。また、フェルミ準位を複数のバンドが横切っており、金属的な電子状態をもつ。図(c)は一軸性の歪みを加えたときのフェルミ準位での状態密度 (DOS) の変化である。赤線と青線はそれぞれ電子ドープとホールドープの場合を表し、黒線は電荷中性点の場合である。電荷中性点からわずかにホールドープした範囲では、DOS は増加するが、電子ドープ系では DOS は減少する。

一方、低密度結晶構造の電子状態は、図(d)に示すように半導体となる。そのため、低密度構造では、キャリアドープをしない限り、状態密度の歪み変化は生じないことがわかる(図(e))。

結晶構造の違いによって、歪み効果に大きな違いが現れることがわかった。

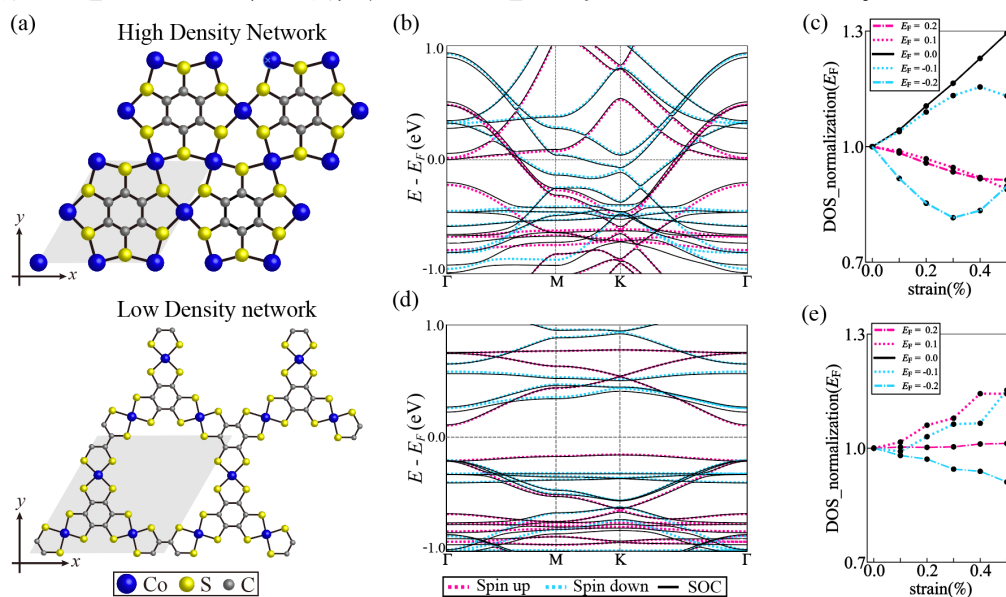


Fig. (a), (d) Crystal structure of CoBHT, and gray area is unit cell. (b), (e) Energy band structure with/without SOC. (c), (f) Strain dependence of DOS for several different carrier doping.

[1] Y. -C. Wang, *et al.*, Adv. Sci. **8**, 2100564 (2021). [2] K. Nishigomi, *et al.*, in preparation.