

アルカリ土類金属ダイシリサイドの電子状態

Electronic structure of alkaline-earth-metal disilicides

(国研) 物質・材料研究機構 ○今井 基晴

NIMS ○Motoharu Imai

E-mail: IMAI.Motoharu@nims.go.jp

はじめに： 前回、3d-遷移金属ダイシリサイドにおいてFig. 1のような軌道相互作用ダイヤグラムを報告した[1]。遷移金属シリサイドの電子構造は、遷移金属d軌道とSi-p軌道の結合状態、反結合状態、および非結合遷移金属d軌道からなっている。半導体3d-遷移金属ダイシリサイドではバンドギャップ E_g が遷移金属d軌道の非結合状態と遷移金属d軌道とSi-p軌道の反結合状態の間に形成されることを明らかにした。

近年薄膜太陽電池材料として注目されているBaSi₂ではシリサイドの構成元素が遷移金属ではなくアルカリ土類金属であるため遷移金属シリサイドとは異なった軌道相互作用ダイヤグラムが構築できることが期待される。

本研究では、BaSi₂の状態密度 (DOS) と射影Crystal Orbital Hamilton Population (pCOHP)を計算し、BaSi₂の電子構造の成り立ちについて検討した。

計算法： 計算コード VASP [2]を用いて DOS の第一原理計算を行った。PBE-GGA、PAW 擬ポテンシャルを使用した。結晶構造パラメータは実験的に報告されている値を使用した。その結果をもとにLOBSTAR [3]を用いてCOHPの計算を行った。

結果及び考察： Fig.2 に BaSi₂ の全 DOS、軌道射影DOS(pDOS)、Si-Si 結合、Ba-Si 結合の pCOHP を示す。フェルミエネルギーを 0 eV としている。-pCOHP では結合状態は正の値、反結合状態では負の値で示される。pDOS から-12~0eV 以下では Si-s 状態及び Si-p 状態が主に DOS を形成されていることがわかる。pCOHP はこれらの状態が Si-Si 結合状態であることを示している。伝導帯は Ba-d、Si-p 状態から形成されている。伝導帯では Si-3p-Si-3p 反結合状態が形成されている。したがって E_g は Si-3p-Si-3p 結合状態と Si-3p-Si-3p 反結合状態+Ba-d 状態の間に形成されていることが明らかになった。当日はこれらのデータをもとに構築したBaSi₂の軌道相互作用ダイヤグラムについて報告する予定である。

参考文献： [1] 今井, 第 71 回応用物理学会春季学術講演会 24p-12K-3, 2024. [2] G. Kresse, J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996). [3] Maintz et al., J. Comp. Chem. **34**, 2557 (2013).

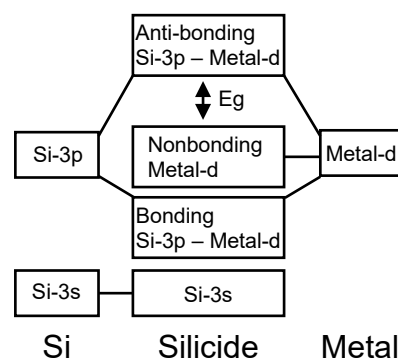
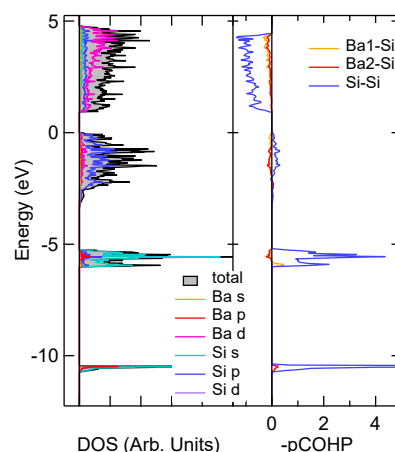


Fig. 1. Orbital interaction diagram of transition-metal disilicides [1].



Density of states and projected Crystal Orbital Hamilton Population (pCOHP) of BaSi₂.