

固体表面上に作製したタリウム原子層結晶の電子状態計算

大阪大学大学院 工学研究科 物理学系専攻 応用物理コース 戸市裕一郎

目的 Si(111)基板の上に島状に成長したタリウム(Tl) 結晶の電子状態を明らかにする。

内容 島状Tlの原子構造を再現するため、バルクTlの(0001)面と同一の原子配列をとるTlスラブモデルを構成し、第一原理計算パッケージQuantum ESPRESSOを用いて構造最適化およびバンド構造計算を行った。Tlスラブモデルの層数は、実験から見積もられた膜厚に基づき13層とし、スピン軌道相互作用を考慮に入れるため、相対論的效果を含むPAW法に基づく擬ポテンシャルを採用した。

結果 理論計算を行った結果、図に示すバンド構造が得られた。実験で観測されたバンド構造と比較することにより、島状TlはTlスラブモデルの中央層のTl原子に由来するバルクライクなバンド構造を有することに加え、最表面層のTl原子に由来する表面状態が存在することを明らかにした。

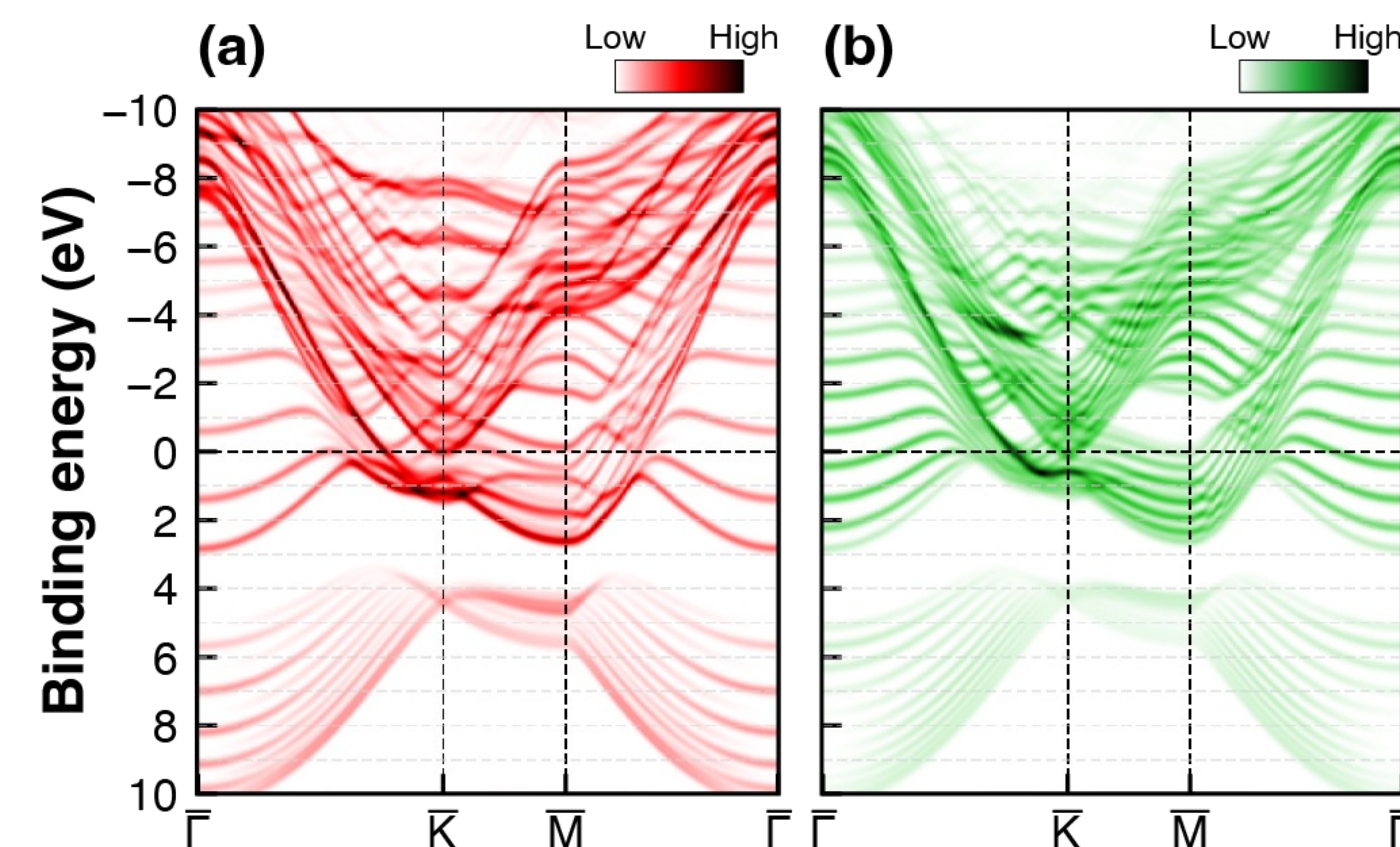


図 理論計算により得られたTlスラブモデルのバンド構造。図のカラースケールは、それぞれ(a)中央層および(b)最表面層のTl原子に由来する p 軌道成分に投影した重みを表す。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群