

## 実空間密度汎関数法コード RSDFT の現状と基板上シリセンへの応用

### Development of RSDFT code and its application to silicene on substrates

郭志新、古家真之介\*、岩田潤一、押山淳

Zhi-Xin Guo, S. Furuya, J.-I. Iwata and A. Oshiyama

東京大学工学系研究科物理工学専攻

Department of Applied Physics, The University of Tokyo, Hongo Tokyo 113-8656

理研および A01 高橋班との共同で開発を進めて来た RSDFT コードを、より広範な物質科学の諸問題に適用すべく、Sakurai-Sugiura (SS) 法固有値ソルバ実装とバンド構造計算への応用 (A01 高橋班櫻井との共同)、コンパクトモデルを用いたバリスティックナノワイヤ FET の電流-電圧特性計算の実装を行った。Si ナノワイヤを次世代のサラウンドゲート型トランジスタのチャンネル材料として利用することを考えるとき、DFT 計算によって得られたエネルギー帯を用い、電流-電圧特性までシミュレーションできるようになれば、デバイス設計に多いに役立つ。その目的のために、現在 RSDFT をベースにした非平衡 Green 関数法の実装を進めているところであるが (A02 渡邊班との共同)、現状の道具立てにおいても、コンパクトモデル [K. Natori, IEEE Trans. Electron Devices 55, 2877 (2008)] を利用することにより、Si ナノワイヤ FET の弾道伝導における電流-電圧特性をシミュレーションすることができる。それによる、Si ナノワイヤ FET での電流電圧特性、ワイヤ断面での電流密度分布を計算した。

また物質科学への応用として、シリセン (ヘキサゴナル蜂の巣構造の Si シート) の原子構造と電子状態を調べた。Free-standing なシリセンは通常自然界には存在せず、実験的には全て、なんらかの基板上にシリセンは形成されている。従って基板とシリセンの結合状況は重要であり、とくにその結合状況と、線形分散に象徴されるディラック電子系の変調は、論争となっている。我々は実験的に最も多用されている Ag(111) 基板上のシリセン単層膜、2 層膜に対して、交換相関相互作用に対する様々な近似 (LDA、GGA、vdW-DFT) を用いて、その安定構造と電子状態を調べた。その結果、いずれの近似も本質的に同一の結果を与えること、得られた構造は STM で実験的に観測されている構造と良い一致を示すこと、フェルミ準位付近には、Si の  $\pi$  電子に起因するディラック電子は存在しないこと、一部光電子分光実験で主張されている線形分散バンドは、Ag の軌道に由来する状態であること、を明らかにした [1]。

\* 現 (株) アルゴグラフィックス

[1] Z.-I. Guo, S. Furuya, J.-I. Iwata and A. Oshiyama, J. Phys. Soc. Jpn. 82, 063714 (2013); Phys. Rev. B 87, 235435 (2013).