

表面欠陥による散乱ポテンシャルの第一原理計算

First-principles study on scattering potential of defect on surfaces

小野 倫也

Tomoya Ono

大阪大学大学院工学研究科

Graduate School of Engineering, Osaka University, Suita Osaka 565-0871

非平衡グリーン関数を用いた輸送特性計算は、タイトバイニング法や局在基底関数を用いた第一原理計算と組み合わせて用いられてきたが、実空間差分法と組み合わせて用いられることはほとんどなかった。これは、 N_x, N_y, N_z をそれぞれ x, y, z 方向のグリッド数としたとき、電極の表面グリーン関数と自己エネルギーを用いる過程で $N_x \times N_y \times N_z$ 次元の逆行列計算が生じるためである。局在基底関数よりも多くのグリッド数を使用する実空間差分法では、逆行列の計算がボトルネックになる。一方、我々が開発した **Overbridging boundary-matching(OBM)**法では、電極の寄与は、接合部分での波動関数の比を用いた $N_x \times N_y \times N_f$ 次元の比行列で取り込んでいる。ここで、 N_f は実空間差分法で用いる差分のオーダーであり、 N_z よりも十分に小さい。我々は、**OBM** 法の比行列と非平衡グリーン関数の表面グリーン関数、自己エネルギーを関連付ける式を発見した[1]。この式を用いることにより、 $N_x \times N_y \times N_z$ 次元の逆行列計算を $N_x \times N_y \times N_f$ 次元に減らすことができる。この方法の有用性を示すアプリケーションとして、**Ge(001)**表面欠陥による散乱ポテンシャルの計算を行った[2]。

走査型トンネル分光顕微鏡を用いた観察により、**Ge(001)**表面の表面原子のひとつを **Si** や **Sn** に置き換えると、伝導帯状態密度の表面での空間分布に振動が観察される[3]。この振動の位相は、置換した原子の種類や位置により異なった振る舞いをする。本研究では、**Ge(001)**表面電子状態の振動のシフトと欠陥原子の散乱ポテンシャルを調べた。状態密度の空間分布振動は、規則正しく並んだ物質中に埋め込まれた欠陥での電子散乱によって引き起こされるため、従来の平面波展開法で用いられる欠陥が周期的に並んだモデルでは正確に扱えない。本研究で開発した方法を用いて、半無限に続く無欠陥の **Ge(001)**表面上にひとつだけ埋め込まれた欠陥原子による散乱を調べた。

計算で得られた伝導帯状態密度の表面での空間分布には、振動が観察され、振動周期と位相は実験結果とよく一致した。また、散乱波の反射係数と透過係数を用いて、一次元箱型ポテンシャルの透過問題に置き換えることにより、散乱ポテンシャルの形状を調べることができる。**Ge(001)**面のダイマーの上側原子が **Si** もしくは下側原子が **Sn** に置換された場合は散乱ポテンシャルが土手型に、下側原子が **Si** もしくは上側原子が **Sn** に置換された場合は井戸型になることが分かった。**Ge(001)**表面では、表面再構成により、ダイマー上側の原子に電子が集まり、フェルミ準位でバンドギャップが開く。電気陰性度が **Si, Ge, Sn** の順に小さくなることを考慮すると、上側原子の電気陰性度が大きいとバンドギャップがさらに開くため、伝導帯電子にとって散乱ポテンシャルが土手型なる。一方、上側原子の電気陰性度が小さいと散乱ポテンシャルが井戸型になると説明できる。

[1] T. Ono, Y. Egami, and K. Hirose, *Phys. Rev. B* 86 195406 (2012).

[2] T. Ono, *Phys. Rev. B* 87 085311 (2013).

[3] K. Tomatsu et al., *Phys. Rev. B* 78 081401(R) (2008).