

(6) 金属・絶縁体超格子  $\text{CoSi}_2/\text{CaF}_2$  の電子構造

赤井 光治

## 研究目的

近年、エピタキシャル成長法などによる結晶成長技術の急速な進歩により、人工格子や人工原子など微細構造を持つ物質設計が可能となった。これにともない半導体ヘテロ接合を持つ電子素子の研究とともに、絶縁体と金属の組み合わせによる電子素子の研究が行われるようになってきている。金属/絶縁体超格子系では、絶縁体のエネルギーギャップが10 eV程度と半導体に比べ遥かに大きい。金属層の間でトンネル電流が生じるためには絶縁体層の厚みが1 nm程度と極めて薄くする必要があり、半導体超格子に比べより精密な生成技術が要求される。このような金属/絶縁体超格子系では、素子の高速化や集積化の向上が期待される。なぜなら、金属の大きなフェルミ面のため金属層の厚みを小さくしても、大きな状態密度がえられることに加え、絶縁体層の厚みが小さくなるためである。

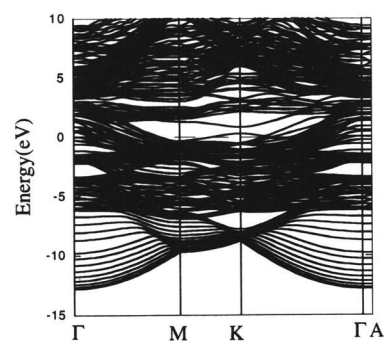
これまで、フッ化物あるいは酸化物と金属の組み合わせによる超格子が作成され、その物性が測られている。しかし、それらの系での物性評価は金属および絶縁体のバルクでの物質パラメータを用いて行われており、超格子系の電子構造に対する理論的な研究はされていない。本研究では実際に素子の作成までなされている  $\text{CoSi}_2/\text{CaF}_2$  超格子系に対し、バンド計算を行い、この系での物性を評価するための基盤となる電子構造を明らかにすることを目的としている。

## 研究成果

$\text{CoSi}_2/\text{CaF}_2$  の結晶構造は共に立方対称な蛍石構造 ( $\text{O}_h^F$ ) であり、格子定数はそれぞれ5.356 Åと5.462 Åである。この時、2つの物質間の格子不整合は2%と小さく、 $\text{CoSi}_2/\text{CaF}_2$  超格子はほとんど格子変形を起こしていないと考えられる。計算では簡単のため、超格子の格子定数を2つの物質の格子定数の平均値  $a = 5.41 \text{ \AA}$  とした。また、超格子の構造は立方晶の [111] 方向に  $\text{CoSi}_2$  および  $\text{CaF}_2$  が交互に積層した構造となっている。電子構造の計算は密度汎関数法に基づくFLAPW法により行なった。このとき、既約な first Brillouin zone 内に14の  $k$  点を取り、Schrodinger-like 一電子方程式を self-consistent に解いた。

図1は  $\text{CoSi}_2/\text{CaF}_2$  超格子のバンド構造を示している。エネルギー原点はFermi準位を表し、破線で示されている。このとき、 $\text{CoSi}_2$  層が27 Åであり、 $\text{CaF}_2$  層が9 Åである。図に示されている各バンドに対し、原子および軌道のキャラクターを調べることで以下のように明らかになった。放物線で表されるバンドの

底の部分は、幅の広い  $\text{CoSi}_2$  の伝導帯の底にあたり、主に Si 原子の sp 軌道により構成されている。このとき、電子の閉じ込めによるサブバンドが表れているのが特徴的である。また、Co原子の d 軌道が-2eV 付近に現れており幅の狭いバンドを形成している。これら、 $\text{CoSi}_2$  金属層のバンドに埋もれて、 $\text{CaF}_2$  絶縁体層のバンドが表れている。実際、Co 原子の d 軌道と Si 原子の sp 軌道の間に F 原子の 2 p バンドが位置しており、Ca 原子に起因する 4 p バンドが 5 eV 付近に現れている。これらのバンドの特徴は図1において  $\Gamma$ -A 軸上のバンド構造に現れている。つまり、金属層の電子は層内に閉じ込められているため、超格子の積層方向つまり  $\Gamma$ -A 軸上で  $\epsilon_k$  は一定で分散を持たない。一方、絶縁体層に状態を持つ電子は金属層にも移動できるため超格子内を自由に移動し、 $\Gamma$ -A 軸上で分散を持つ。このことから、金属/絶縁体超格子系においてもほぼバルクと同じ大きさのエネルギーギャップを持つことが示される。更に、状態密度、バンドオフセットを計算した。今後、これらの電子構造に基づき  $\text{CoSi}_2/\text{CaF}_2$  超格子の電子物性が明らかにされることが期待される。

図1.  $\text{CoSi}_2/\text{CaF}_2$  超格子のバンド構造

## 研究発表

- 1) 赤井光治、松浦満；金属  $\text{CoSi}_2$ /絶縁体  $\text{CaF}_2$  超格子の電子構造：光物性研究会'98 論文集 pp. 291-294.
- 2) K. Akai and M. Matsuura：Electronic structure of metal； $\text{CoSi}_2$ /insulator  $\text{CaF}_2$  superlattice：Phys. Rev B (submitted).

## 連絡先

TEL：35-9496 FAX：35-9497

E-mail：akai@po.cc.yamaguchi-u.ac.jp