

## 2P084 強磁性 Fe<sub>3</sub>Si 結晶の表面電子状態についての密度汎関数計算

(九大院総理工) ○執行大輔, 森 寛敏, 吉武 剛, 三好永作

### 【はじめに】

半導体と磁性体のヘテロ構造を持つ積層膜がいま注目を集めている。これらのヘテロ構造を作製することは極めて困難であるが、その構造が実現されれば材料設計の自由度が大幅に広がり、従来の半導体および金属のみからなるヘテロ構造では得られなかった、磁気や光による電流制御の可能性など新しいデバイスの実現が期待されている。強磁性の Fe<sub>3</sub>Si と Fe-Si 系の半導体により有用なヘテロ構造を作成する際にキーとなる情報は、強磁性の Fe<sub>3</sub>Si 薄膜の表面電子状態である。Fe<sub>3</sub>Si 結晶のいろいろの表面電子状態を調べることで、ヘテロ構造をどの面で作ればより良いものが出るかについての情報が得られる。本研究では、周期的境界条件を使い Fe<sub>3</sub>Si 薄膜無限系の (1 1 1) 表面と (1 0 0) 表面の電子状態について密度汎関数法を使って計算し、特に、様々な表面近傍の LDOS (Local Density of States) を調べることを目的とする。あわせて FeSi の様々なクラスターを計算することにより様々な Fe と Si の間の結合についての情報を得ることを目指す。

### 【計算方法】

Fe<sub>3</sub>Si の結晶構造は図 1 の通りである。この結晶中の黒丸のサイトに Si 原子が位置し、その他のサイトに Fe 原子が位置している。(1 1 1) 方向や (1 0 0) 方向の数層を考え、水平方向については周期的境界条件を使い、無限系を考える。Fe と Si には Stevens らの有効内殻ポテンシャル (SBKLC ECP) を使用し、BLYP による密度汎関数計算を行った。

このような無限系薄膜の計算以外にも、いくつかの FeSi クラスターの計算を行い、電子状態のを調べる。クラスター計算には、Fe, Si とともにわれわれのモデル内殻ポテンシャル (MCP) を用いて、CASSCF 計算を行う。無限

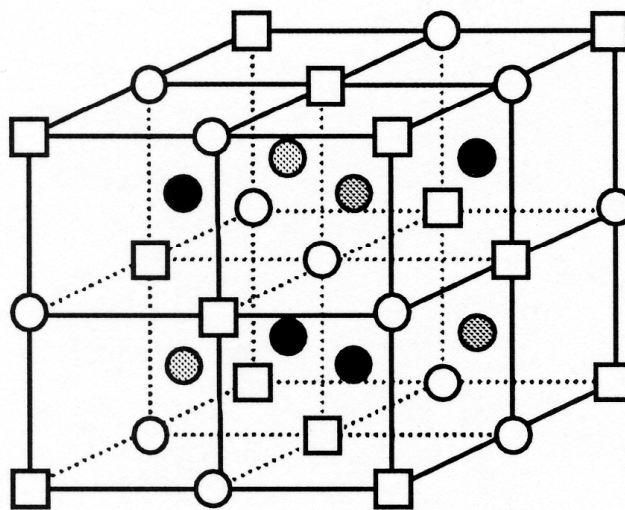


図 1. DO<sub>3</sub>型 Fe<sub>3</sub>Si 結晶の構造

系薄膜の計算は，GAUSSIAN03 を用いて行い，その他のクラスターの計算は GAMESS を用いて行った．

### 【結果と議論】

現在，無限系薄膜の計算を行っているが，波動関数の収斂が大変難しく，その計算結果を得るに至っていない．表 1 に FeSi クラスターの  $^3\Delta$  および  $^5\Pi$  状態に対する (9,12)CASSCF 計算による電荷分布解析の結果を示す．このクラスターの基底状態は  $^3\Delta$  状態であり，主電子配置は  $(\text{Si}3s)^2(\text{Fe}4s+\text{Si}3p)^2(d_\sigma)^1(d_\pi+3p_\pi)^4(d_\delta)^3$  であり，一方， $^5\Pi$  状態の主電子配置は  $(\text{Si}3s)^2(\text{Fe}4s+\text{Si}3p)^2(d_\sigma)^1(d_\pi+3p_\pi)^4(d_\pi-3p_\pi)^1(d_\delta)^2$  となっている[1]．どちらの状態でも Fe 原子は Si 原子と結合することで，0.3 個の電子を Si に与えている．Fe-Si の Overlap Population は 0.6~0.7 と大きく共有結合性を示しており，Fe 原子中の d 軌道にはほぼ 6 個の電子が占有している．

密度汎関数計算による無限系薄膜の計算結果と CASSCF 計算による大きなクラスターの計算結果は，当日発表することにする

表 1. FeSi クラスターの  $^3\Delta$  および  $^5\Pi$  状態についての電荷分布解析

	Fe	Fe-Si	Si
$^3\Delta$ 状態	s: 1.426	0.68	s: 1.870
	p: 6.142		p: 2.416
	d: 6.110		d: 0.036
	Charge: +0.323		Charge: -0.323
$^5\Pi$ 状態	s: 1.484	0.61	s: 1.876
	p: 6.152		p: 2.407
	d: 6.048		d: 0.032
	Charge: +0.315		Charge: -0.315

### 【参考文献】

[1] M. Sekiya, K. Miwa, K. Tanaka, M. Yoshimine, *Mol. Phys.* **101**, 99-104 (2003).