

| | |
|--------------|---|
| Title | 分子動力学法によるPb _{1-x} GexTeの局所格子緩和シミュレーション |
| Author(s) | 丸山, 志乃 |
| Citation | |
| Issue Date | 2001-03 |
| Type | Thesis or Dissertation |
| Text version | none |
| URL | http://hdl.handle.net/10119/2775 |
| Rights | |
| Description | Supervisor:片山 信一, 材料科学研究科, 修士 |

狭いエネルギーギャップ ($\sim 0.3\text{eV}$) を持つ PbTe 、 SnTe 、 GeTe 半導体は、赤外線レーザーや検知器の素材として注目を集めてきた。これらの化合物は、相互に混晶化すると、低温で NaCl 構造から菱面体構造へ転移し、強誘電性を発現する非常に興味深い系でもある。ところで $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ 、 $\text{Sn}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Te}$ では、種々の物性量や相転移特性が、ほぼベガード則に従う組成変化を示すのに反し、 $\text{Pb}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Te}$ は Ge 含有量の小さい範囲で特異な組成依存性を有することが知られている。これは Pb^{2+} (1.2) と Ge^{2+} (0.73) イオン半径の大きな差から生じると考えられている。

本研究の目的は、分子動力学法を用いて、 $\text{Pb}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Te}$ の格子緩和のシミュレーションを行い、特に Ge イオン近傍の様子を探ることにある。本研究では、完全イオン性ポテンシャルを採用した。これは各粒子を完全な球形イオンと仮定し、2つの粒子間に働く相互作用を静電項と近接反発項からなるとしたもので、

$$u_{ij} = \frac{z_i z_j e^2}{r_{ij}} + f_0(b_i + b_j) \exp \left[\frac{a_i + a_j - r_{ij}}{b_i + b_j} \right]$$

と表される。右辺第1項が静電項で、第2項が近接反発項を示す。 a_i はイオン半径に比例する定数で Pb^{2+} 、 Ge^{2+} 、 Sn^{2+} 、 Te^{2-} の順でそれぞれ $a = 1.450$ 、 0.966 、 1.300 、 2.352 、 b_i は球の軟らかさのパラメータで、各イオン同一の $b = 0.080$ を用いた。粒子数 512 個、基本セルとして結晶単位格子長を各方向に 4 倍したものを採用し、温度を 300K と仮定した。図 1 の上(下)パネルには $\text{Pb}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}\text{Te}$ ($\text{Pb}_{0.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Te}$) の 2 体相関関数を示す。2.5 から 3.5 の範囲に現れるピーク構造は、 Pb-Te 、 Ge-Te (Sn-Te) ボンドの分布であり、結晶の第 1 隣接に対応する。4.0 から 5.0 の範囲に来るのは、 Te-Te 、 Pb-Pb 、 Ge-Ge 、 Pb-Ge (Sn-Sn 、 Pb-Sn) 対の空間分布を表し、第 2 隣接位置に対応する。図 2 の上(下)パネルでは、2 体相関関数から得た $\text{Pb}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}\text{Te}$ ($\text{Pb}_{0.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Te}$) の最隣接ボンド長の組成変化を示す。また、各ボンド長につけた縦棒は図 1 の 2 体相関関数における分布の広がりを示す。この結果から、 Sn と比べて Ge が Pb サイトから 0.3 から 0.5 の範囲で大きく動いていることが期待される。

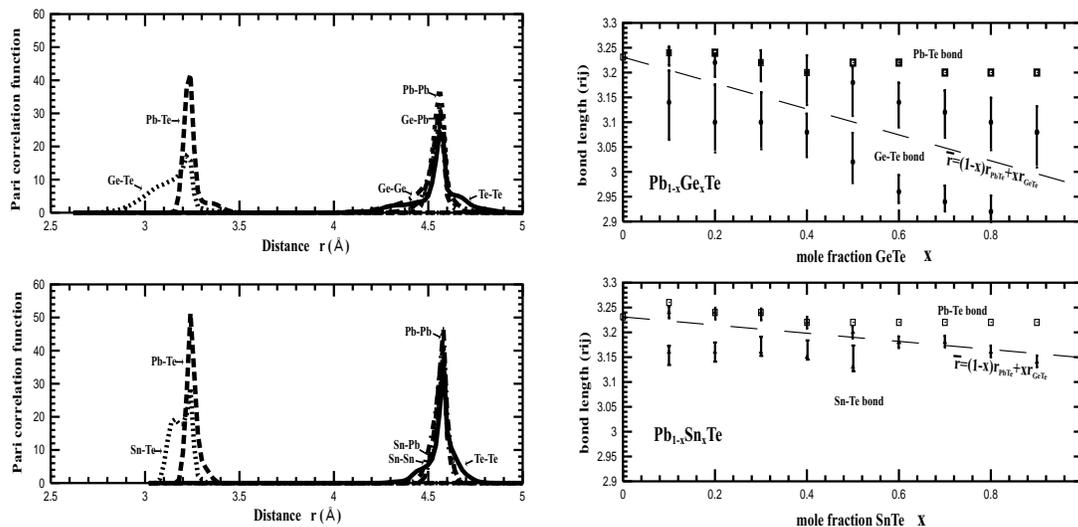


図 1: $\text{Pb}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Te}$, $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ の 2 体相関関数 図 2: Ge , Sn の局所ボンド長の濃度依存性

keywords $\text{Pb}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Te}$, 分子動力学シミュレーション, 局所緩和