

ウルツ鉱型 β -CuGaO₂, β -AgGaO₂ の第一原理計算First principle calculation of wurtzite β -CuGaO₂ and β -AgGaO₂

阪大院工¹ 富山高専² 山梨大工³ NIMS⁴ ◯鈴木 一誓¹, 長谷 拓¹,
喜多 正雄², 井口 雄喜³, 佐藤 千友紀³, 柳博³, 大橋直樹⁴, 小俣 孝久¹

Osaka Univ.¹, Toyama Natl. Coll. Tech.², Yamanashi Univ.³, NIMS⁴

◯Issei Suzuki¹, Hiraku Nagatani¹, Kita Masao², Yuki Iguchi³, Chiyuki Sato³, Hiroshi Yanagi³,
Naoki Ohashi⁴, Takahisa Omata¹

E-mail: omata@mat.eng.osaka-u.ac.jp

ウルツ鉱型 β -CuGaO₂ や β -AgGaO₂ は、酸化物半導体の可視～近赤外域での応用を可能とする物質系である。それらの電氣的・光学的性質の推察や理解において、電子構造は重要な知見を与える。いままでに、GGA を汎関数に用いた第一原理計算により、 β -CuGaO₂ は直接遷移型半導体であること、価電子帯の上端近傍の状態密度が大きいためバンド端近傍で大きな吸収係数が期待できることがわかっている。しかし、GGA による第一原理計算では、Cu 3d のバンド幅が過小評価されたり、電子の有効質量が非常に大きく計算されるなどの問題があった。本研究では、それらの問題を解決することを狙って、オンサイトクーロンエネルギー: U をとり入れた汎関数 LDA+ U を用いて計算をした。

計算プログラムには CASTEP を使用し、汎関数に LDA+ U を用いた。 U 値は 0～8 eV で変えた。擬ポテンシャルはノルム保存型ポテンシャルを用い、平面波のカットオフエネルギーは 840 eV とした。XPS スペクトルは AgL α 線(2984.2eV)を励起光に測定した。

Fig.1(a)~(d)に、GGA と LDA+ U ($U = 3, 6$ eV)で計算した β -CuGaO₂ の価電子帯の状態密度(DOS)、および、価電子帯の XPS スペクトルを示す。LDA+ U では U の値を大きくするとともに Cu 3d バンド幅が広がり、XPS による実測値に近づき、GGA での Cu 3d バンド幅の過小評価が改善された。Fig.2(a),(b)に GGA と LDA+ U ($U = 6$ eV)で計算した伝導帯の底部の DOS を示す。GGA による計算では、伝導帯の底部に局在性の強い Cu 3d が大きく寄与している。酸化物はイオン性が強いので、 $d^{10}s^0$ の電子配置のカチオンの d^{10} 軌道が伝導帯へ混成することは通常考えられない。LDA+ U の計算では、Cu 3d 軌道の伝導帯へ混成がなく(Fig.2(b))、他の $d^{10}s^0$ 電子配置の酸化物と同様に伝導帯の底部は s 軌道が支配的となった。以上のように、LDA+ U では GGA よりも実測の電子構造を再現できることがわかった。計算結果をもとにした β -CuGaO₂ の電氣的・光学的性質については、 β -AgGaO₂ の計算結果と共に当日の講演で述べる。

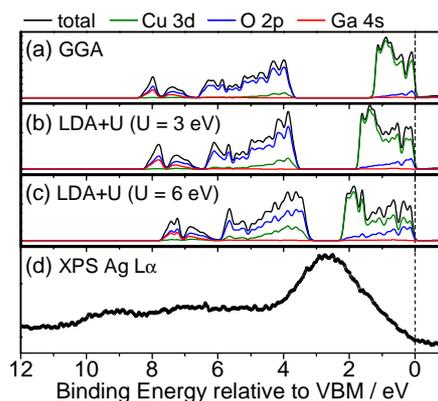


Fig. 1 Partial DOS of β -CuGaO₂ calculated by using (a) GGA and (b),(c) LDA+ U ($U = 3, 6$ eV). (d) Ag L α excited valence band XPS spectrum of β -CuGaO₂. (The cross-section ratio for Ag L α excitation is Cu 3d : O 2p : Ga 4s = 1 : 0.05 : 0.53)

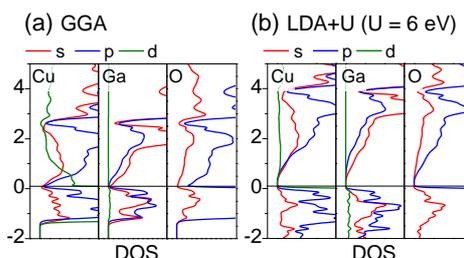


Fig.2 Partial DOS of β -CuGaO₂ calculated by using (a) GGA and (b) LDA+ U ($U = 6$ eV).