

第一原理計算によるウルツ鉱型 β -CuGaO₂, β -AgGaO₂ の電子構造解析First principle calculation of electronic band structure 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¹Osaka 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 およびそれらと ZnO との混晶は、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ことがこれまでに明らかとなっている。それらの電気的・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。本研究では、第一原理計算により β -CuGaO₂、 β -AgGaO₂ の電子構造を解析した。計算により得られた電子構造を光電子スペクトルと比較し、計算結果の妥当性を検討した。

密度汎関数法を用いて結晶構造を最適化し、エネルギーバンド構造を計算した。計算プログラムには CASTEP を使用し、汎関数に GGA および sX-LDA を用いた。 k 点は Monkhorst-Pack に基づいて $5 \times 4 \times 5$ とした。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。AgLa 線(2984.2eV)を励起光とし、 β -CuGaO₂ と β -AgGaO₂ の価電子帯の光電子スペクトル(XPS)を測定した。

Fig. 1 に GGA により計算した、 β -CuGaO₂ のバンド構造と PDOS を示す。VBM と CBM は共に Γ 点にあり、 β -CuGaO₂ が直接遷移型半導体であることが示された。また、VBM の近傍は Cu 3d 軌道から主に構成されており、状態密度が非常に大きくなっている。この特徴は CuInSe₂ の電子構造の特徴と類似し、吸収端近傍で大きな吸収係数を有することが示唆され、バンドギャップが 1.47 eV であることと併せると、 β -CuGaO₂ は薄膜太陽電池に適した半導体材料であるといえる。

VBM が Cu 3d 軌道から構成されるという特徴は、p 型伝導性を示す Cu₂O やデラフォサイト型 α -CuGaO₂ と同様であり、 β -CuGaO₂ での p 型伝導性の発現が示唆される。一方、CBM は、Cu と Ga の 4s 軌道が混成した分散の大きなバンドから成り、ZnO などの n 型伝導性酸化物の特徴と一致する。すなわち、 β -CuGaO₂ では p/n 両極伝導が期待できる。 β -AgGaO₂ は既報と同様に間接遷移型となった。これらのウルツ鉱型化合物の計算結果は、デラフォサイト型の α -CuGaO₂、 α -AgGaO₂ の計算結果と比較し、I-III-O₂ 酸化物半導体の電子構造について系統的に整理した。

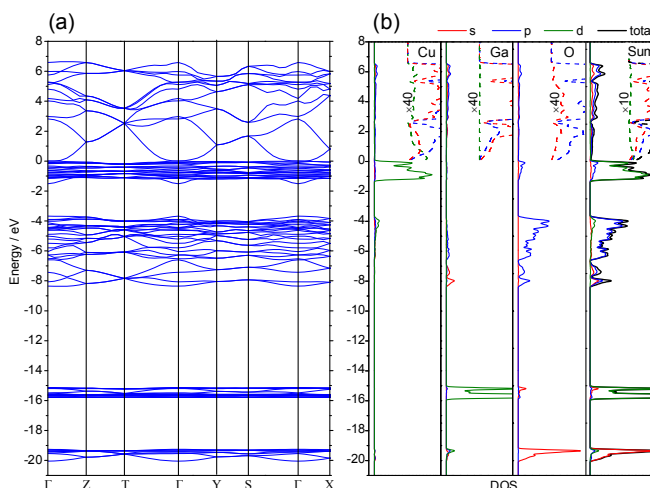


Fig.1 Electronic band structure of β -CuGaO₂ calculated using GGA. (a) The band structure along with the symmetry lines. (b) Corresponding total and partial density of states.