

Ba_{1-x}Sr_xSi₂ の電子構造

Electronic structure of Ba_{1-x}Sr_xSi₂

○今井 基晴¹、Mukesh Kumar、梅澤 直人¹ (物材機構¹)

○Motoharu Imai¹, Mukesh Kumar, Naoto Umezawa¹ (NIMS¹)

E-mail: IMAI.Motoharu@nims.go.jp

はじめに : BaSi₂ は 1.3eV の間接型エネルギーギャップを持ち大きな光吸収係数を持つことから太陽電池材料として注目されており、エネルギーギャップ (E_g)、結晶構造における元素置換効果についても研究が行われている[1-3]。BaSi₂ は室温大気圧下で BaSi₂ 型構造を持っており、Si 原子は Si₄ 四面体を形成している (図 1)。結晶学的には単位胞当り 2 種類の Ba サイト (A1, A2) と 3 種類の Si サイト (Si1, Si2, Si3) が存在している。これ以降では、A1 サイトを占有する Ba 原子を Sr 原子で置換した Ba_{0.5}Sr_{0.5}Si₂ を A1-Sr-BSS、A2 サイトの Ba 原子を Sr 原子で置換したものを A2-Sr-BSS とする。従来の計算結果では、A1-Sr-BSS の方が A2-Sr-BSS よりもエネルギー的に安定であること、A1-Sr-BSS の E_g は BaSi₂ のそれに比べ 0.07eV 増加する一方で、A2-Sr-BSS の E_g は 0.14eV 減少することが報告されている[2]。しかしながら、それ以上の詳細は報告されていない。

そこで本研究では、BaSi₂ 型構造を持つ BaSi₂、SrSi₂、A1-Sr-BSS、A2-Sr-BSS の第一原理計算を行い、それぞれの化合物の電子構造について詳細について調べた。

実験 : BaSi₂、SrSi₂、A1-Sr-BSS、A2-Sr-BSS の電子構造計算は密度汎関数理論 (DFT) に基づく第一原理計算コード VASP を用いて行った。電子交換相関エネルギーは Perdew-Burke-Ernzerhof の汎関数を用いて計算した。

結果 : BaSi₂、SrSi₂、A1-Sr-BSS、A2-Sr-BSS のバンド構造を計算した。4 つの化合物で、価電子帯の上端は Γ 点と Y 点の中間の k 点、伝導帯の下端は T 点に位置することが分かった。A1-Sr-BSS の E_g は BaSi₂ のそれに比べわずかに 0.01eV 増加する一方で、A2-Sr-BSS の E_g は 0.06eV 減少する。BaSi₂ に対する A1-Sr-BSS、A2-Sr-BSS の E_g の変化の方向は従来の結果と同じであるが、その大きさは従来の結果に比べて小さい。当日は更に詳細な解析結果についても述べる予定である。

[1] K. Morita et al., Jpn. J. Appl. Phys. Part2 45, L390 (2006).

[2] Y. Imai and A. Watanabe, Thin Solid Films 515, 8219 (2007).

[3] M. Imai et al., Intermetallics 18, 548 (2010).

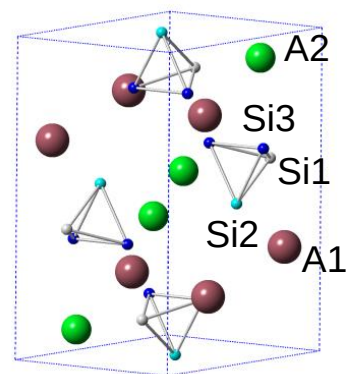


図 1 BaSi₂ の結晶構造