

BaSi₂ の電子構造

Electronic structure of BaSi₂

○今井 基晴¹、Mukesh Kumar¹、梅澤 直人¹ (物材機構¹)

○Motoharu Imai¹、Mukesh Kumar¹、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おり、そのバンド構造の計算がいくつか行われている [1-4]。これらの報告では、価電子帯の上端および伝導帯の下端が位置する波数ベクトルは異なっている。Ref. 1 では価電子帯の上端はT点と Y 点の間、伝導帯の下端はT点と Y 点の間またはU 点に位置する。Refs. 2-3 では価電子帯の上端はΓ点と Y 点の間、伝導帯の下端はT点に位置している。また Ref. 4 では価電子帯の上端はΓ点と X 点の間、伝導帯の下端は U 点に位置している。これらの違いの原因は明らかになっていない。また、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)。Si₄ 四面体の電子構造と BaSi₂ の電子構造は関係があるように見えるが詳細は明らかになっていない。

そこで本研究では、BaSi₂ の第一原理計算を行い、バンド構造および電子構造について調べた。また、Si₄ 四面体および BaSi₂ の結晶構造から Ba 原子だけを抜いた 4Si₄ の電子構造計算もを行い、BaSi₂ のそれと比較した。

実験 : 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 : 我々の計算した BaSi₂ のバンド構造では、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 点に位置している[5]。この結果は、Refs.2-3 と一致する。Ref.4 の計算で使用されている結晶構造を検討した結果、我々が使用した結晶構造とは b 軸と c 軸が入れ替わっており、これが Ref.4 のバンド構造が違う原因であることが判明した。当日は、Si₄ 四面体、4Si₄、BaSi₂ の電子状態の比較についても述べる予定である。

[1] Nakamura et al., Appl. Phys. Lett. **81**, 1032 (2002).

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

[3] Migas et al., Phys. Solid status (b) **244**, 2661 (2007)

[4] Materials Project mp-1477, <https://materialsproject.org/>

[5] Kumar et al., Appl. Phys. Express **7**, 071203 (2014).

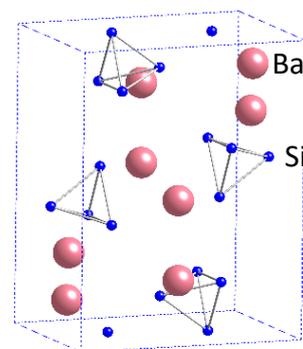


図 1 BaSi₂ の結晶構造