

岩塩構造 $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ の吸収端の観測と電子状態計算

Observation of Absorption Edge and Electronic Structure Calculation of Rocksalt-structured $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$

工学院大¹, 京大院工², [○]尾沼 猛儀¹, 小野 瑞生¹, 石井 恭平²,
金子 健太郎², 山口 智広¹, 藤田 静雄², 本田 徹¹

Kogakuin Univ.¹, Kyoto Univ.², [○]T. Onuma¹, M. Ono¹, K. Ishii²,

K. Kaneko², T. Yamaguchi¹, S. Fujita², T. Honda¹

E-mail: onuma@cc.kogakuin.ac.jp

[はじめに] 岩塩構造(RS)- $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ は、バンドギャップ(E_g)が 7.8 eV の MgO [1]と ZnO の混晶化により、波長 160-200 nm の遠紫外線(FUV)領域並びに 200-250 nm の深紫外線(DUV)領域の発光素子材料として高いポテンシャルを秘める。しかし、 MgO はバンド端発光[2]を呈し直接遷移型である一方、RS- $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ 混晶に関しては実験[3,4]、理論ともに報告例が少なく、直接遷移型か間接遷移型かすら明らかになっていない。そこで、本講演では、光学測定から RS- $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ の吸収端を観測し、 MgO モル分率 x に対する E_g の変化を、電子状態計算を基に考察した結果を報告する。

[実験] (001) MgO 基板上へミスト CVD 法により成長[5,6]した 100-550 nm 厚の RS- $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ 薄膜の測定を行った。 x は EDX により測定した。透過率測定では、光学系全体の窒素パージにより波長 120 nm までの測定が可能な FUV 分光システムを用いた。電子状態計算には WIEN2k を使い、GGA (PBE96) で得られた結果に対し、 E_g の再現性が比較的良好な TB-mBJ 交換・相関汎関数を使用した。格子定数は実験値 (MgO : 4.211 Å, ZnO : 4.280 Å) をベガード則により線形補間した。基本単位格子を $2 \times 2 \times 2$ した合計 16 原子のスーパーセルに対し Supercell プログラムにより混晶の単位格子を構築した。 k 点は $10 \times 10 \times 10$ (1000 点) とした。

[結果と考察] 室温透過率スペクトルから Tauc プロットを行い、線形フィットより E_g を決定した。得られた E_g を x に対し図へ赤丸でプロットした。図にはこれまでの報告値[1,3,4]と、金子他により XPS 測定により決定した E_g の値[5]も示す。これらに対し、電子状態計算により得られた値を黒丸と黒三角で示す。ただし、 Mg と Zn 原子が均一に分布する単位格子に対し得られた値を抜粋して示す。黒丸は Γ 点における直接遷移エネルギー($\Gamma_v\text{-}\Gamma_c$)、黒三角は R 点から Γ 点への間接遷移エネルギー($R_v\text{-}\Gamma_c$)を示す。計算から、 $x=0.5$ 付近で間接遷移型から直接遷移型に変化することが分かった。実験値を良く再現していることから、計算が比較的妥当であることが分かる。XPS で決定した値が 0.8-1.0 eV ほど大きいのが、報告された薄膜の x は XRD 測定でベガード則に従い求められた値であったため、面内圧縮歪により低めに見積もられていたためと考えられる。全ての試料でバンド端付近の DUV 発光が観測され、低温での結果であるが 0.7-0.9 eV ほど低エネルギー側に発光ピークが観測された。

[謝辞] 本研究の一部は科研費 (#17H01263) の援助を受けた。電子状態計算に協力頂いた東京都立産業技術研究センターの太田優一博士に感謝申し上げる。

[参考文献] [1] R. C. Whited and W. C. Walker, Phys. Rev. Lett. **22**, 1428 (1969). [2] Ch. B. Lushchik *et al.*, J. Luminescence **11**, 285 (1975). [3] S. Choopun *et al.*, Appl. Phys. Lett. **80**, 1529 (2002). [4] I. Takeuchi *et al.*, J. Appl. Phys. **94**, 7336 (2003). [5] K. Kaneko *et al.*, Appl. Phys. Express **9**, 111102 (2016). [6] K. Ishii *et al.*, JSMS Committee on Semiconductor Electronics, Kyoto, July 15 (2017), No. 9.

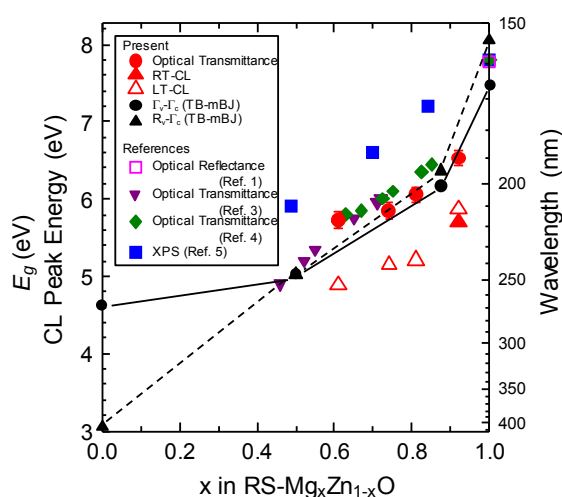


Figure Experimentally and theoretically determined E_g values and cathodoluminescence peak energies in RS- $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ as a function of x .