

α -Ir₂O₃ のバンド構造

Electronic band structures of α -Ir₂O₃

都産技研 ○太田 優一

TIRI ○Yuichi Ota

E-mail: ota.yuichi@iri-tokyo.jp

新しいコランダム型酸化物半導体として α -Ir₂O₃ が報告されている。この物質はアンドープの単結晶で p 型の電気伝導を示すことから、pn ヘテロ接合のデバイスが実現可能である[1]。しかし、 α -Ir₂O₃ の基本的な物性については不明な点が多く、明確なバンド構造も報告されていない。そこで本研究では、 α -Ir₂O₃ のバンド構造を密度汎関数理論(DFT)に基づく第一原理計算によって明らかにすることを目的とした。

本計算ではまず、Quantum Espresso にて α -Ir₂O₃ の結晶構造の最適化を行い、原子位置と格子定数を決めた。その後(L)APW+lo 法(Wien2k)によってバンド構造を計算した。なお、バンド構造を計算するにはスピン軌道相互作用の効果を加え、ギャップの過小評価を改善するために汎関数として Meta-GGA (TB-mBJ)を使用した。

Fig. 1 に第一原理的に決定した結晶構造で計算した α -Ir₂O₃ のバンド構造を示す。価電子帯上端(VBM)が Γ -S₀ 点の間に位置し、伝導帯下端(CBM)は F 点付近にある間接遷移型のバンド構造となった。これらの点でバンドギャップ(E_g)を見積もると約 1.7 eV となる。実験的には α -Ga₂O₃ と a 軸の格子定数がほぼ同じであると報告されているが、今回の計算では α -Ir₂O₃ の a 軸は約 5.26 Å となった。そこで、 α -Ir₂O₃ の格子定数を DFT で決めた α -Ga₂O₃ の値に変更し、 a, b 軸を拘束した状態で構造最適化を実施した後にバンド構造を計算した(Fig. 2)。この条件では VBM は Γ 点、CBM は S₂-F 点の間に位置する構造となり、 E_g は約 1.8 eV に変化した。さらに伝導帯に着目すると Γ 点と F 点のエネルギー差が 0.02 eV 程度まで小さくなった。これらは a, b 軸を縮めた結果によって起きたものである。したがって、 α -Ir₂O₃ は基本的に間接遷移型のバンド構造を有するが、圧縮歪みの影響によってバンド間の遷移点が変わる可能性が高いことを明らかにした。

[1] S. Kan *et al.*, Appl. Phys. Lett. **113**, 212104 (2018).

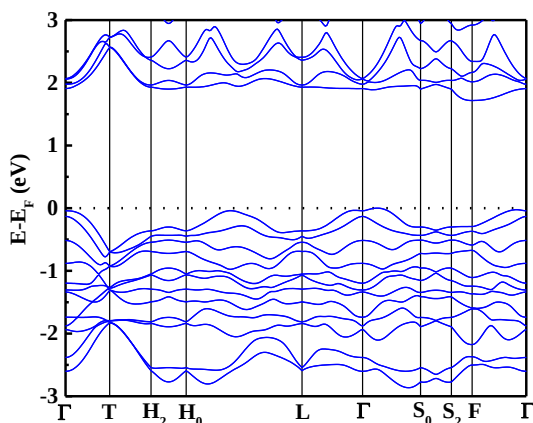


Fig. 1. Band structure of α -Ir₂O₃.

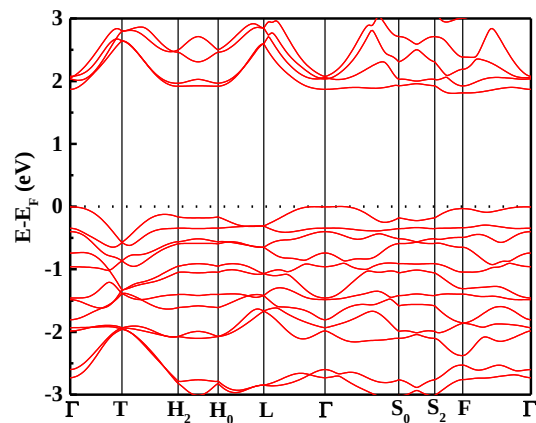


Fig. 2. Band structure of strained α -Ir₂O₃.