

岩塩型 $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ のバンドアライメント

Band alignment of rock salt structured $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$

都産技研 ○太田 優一

TIRI ○Yuichi Ota

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

岩塩構造(RS)の MgO は 7.8 eV の直接遷移型のバンド構造であることから、 ZnO との混晶により深紫外領域の発光素子への応用が期待されている。最近、RS- $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ の混晶($x = 0.95$)で 199 nm(6.24 eV)の CL 発光が報告された[1]。したがって、新たに酸化物も深紫外デバイス応用の有力な材料の候補になったといえる。しかし、RS- $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ についてはデバイス設計に必要な各組成におけるバンドアライメントが明らかになっていない。そこで本研究では RS- $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ のバンドアライメントを第一原理計算の結果を基に予測することを目的とした。

計算モデルは RS の単位胞を $2 \times 2 \times 2$ 倍した構造を採用した。また混晶における原子配置を生成熱の比較により検討し、最も安定な構造を決定した。各組成における安定構造において電子状態計算を行い、バンドギャップ(E_g)を算出した。さらに RS- $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ の E_g 値と固体エネルギー(SSE)を使用してバンドアライメントを推定した[2]。

Fig. 1 に RS- $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ のバンドアライメントを示す。なお、このバンドアライメントは歪み等の外因的影響を考慮していない自然な配列である。価電子帯上端(VBM)は酸素の 2p が主に支配しているため、 $\text{Mg}(\text{Zn})$ の組成が変化しても VBM の位置は大きく変化しない。したがって価電子帯のオフセット値は最大で 0.7 eV 程度であるが、伝導帯のオフセットは最大で 3.7 eV 程度になることがわかった。

[1] K. Ishii *et al.* Appl. Phys. Express **12**, 052011 (2019).

[2] Y.Ota submitted for CrystEngComm.

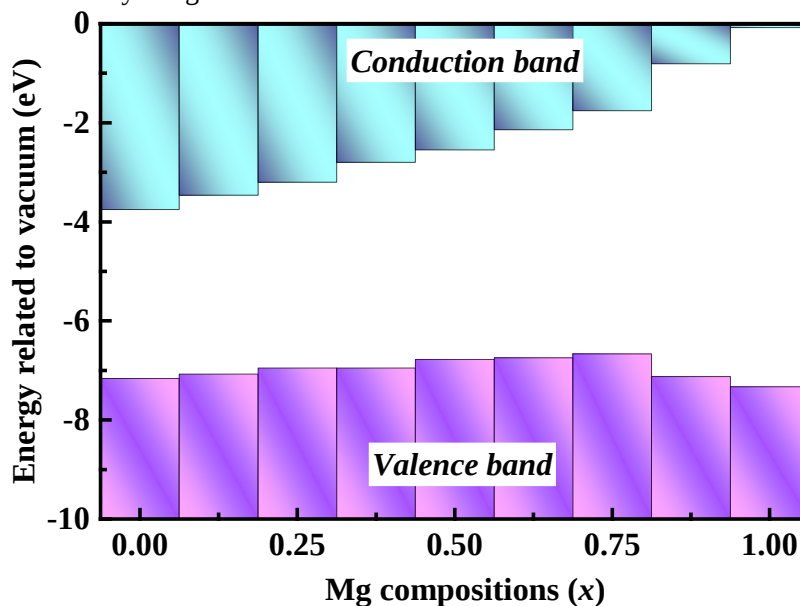


Fig. 1 Band alignment of RS- $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$.