

NaSi の電子状態と光学的性質

Electronic States and Optical Properties of NaSi

物材機構¹ 東北大学² ○今井 基晴¹、山田 高広²、山根 久典²

NIMS¹, Tohoku Univ.² °Motoharu IMAI¹, Takahiro YAMADA², Hisanori YAMANE²

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

はじめに： BaSi₂は室温大気圧下で、Si原子がSi₄四面体を形成しているBaSi₂型構造をとっている。BaSi₂は1.1-1.3eVのバンドギャップを持つ間接遷移型半導体であり、1.5eVで大きな光吸収係数 α を持つことから太陽電池材料として盛んに研究されている。間接遷移型半導体にもかかわらず大きい光吸収係数を持つという性質は、BaSi₂のバンド端付近の価電子帯、伝導帯のバンド構造が比較的平坦であり、複数の極大点・極小点を持つために、間接遷移型バンドギャップよりも僅かに大きい直接遷移型バンドギャップが複数存在することに起因している[1, 2]。このバンド構造は、特徴的なBaSi₂の結晶構造を反映している。このことから、Si₄四面体を結晶構造のモチーフとして持つ他のシリサイドで電子構造・光学的性質がどのようになっているか、調べることは興味深い。本研究では、結晶構造にSi₄四面体を持つナトリウムシリサイドNaSiに注目した。第一原理計算によりNaSiのバンド構造、状態密度 (DOS)、光学特性を計算した。更に、NaSiを合成し、拡散反射法により光吸収を測定した。

計算： NaSi のバンド構造、DOS、光学特性の計算は密度汎関数理論 (DFT) に基づく第一原理計算コード Advance/Phase を用いて行った。電子交換相関エネルギーは Perdew-Burke-Ernzerhof の (PBE)汎関数を用いて計算した。

結果： 図1にNaSiのバンド構造を示す。価電子帯の最大値は Γ 点とX点の間の点に、伝導帯の最小値はY点に存在することから、NaSiは間接遷移型半導体である。この間接遷移型バンドギャップは1.10eVである。PBE汎関数を用いて計算したBaSi₂のバンドギャップより0.35eV大きい。

HSE06汎関数を用いて計算したバンドギャップは1.68eVである。この間接遷移型ギャップよりも0.1eV程度大きい直接遷移型ギャップが、Y、F、F1点、M-N間の点に存在し、光吸収係数が大きくなることを示唆している。当日は、計算した光学特性、拡散反射法により測定したNaSiの光吸収についても発表する予定である。

参考文献： [1] 今井基晴、梅澤直人、日本物理学会誌 **75**, 148 (2020). [2] M. Imai et al., Scripta Mater. **172**, 43 (2019).

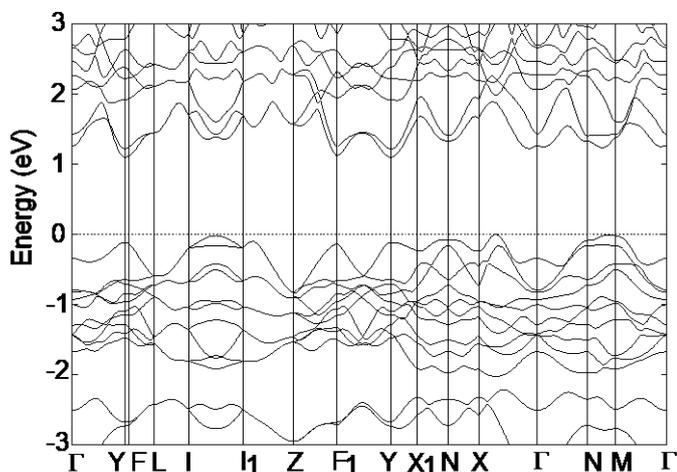


図1 NaSi のバンド構造