

岩塩構造 MgZnO 混晶の電子有効質量の推定

Estimation for the electron effective mass of Rocksalt-structured MgZnO alloy

都産技研¹, 京都大学², 工学院大学³, ○太田 優一¹, 金子 健太郎², 尾沼 猛儀³, 藤田 静雄²

TIRI¹, Kyoto Univ.², Kogakuin Univ.³, °Y. Ota¹, K. Kaneko², T. Onuma³, S. Fujita²

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

深紫外線(DUV)や真空紫外線(VUV)への応用が可能な固体発光素子として岩塩構造酸化マグネシウム亜鉛の混晶(RS-Mg_xZn_{1-x}O)に注目している。既に高 Mg 組成の発光特性等をカソードルミネッセンス(CL)測定にて明らかにしてきたが[1]、基礎的な物性が未だ不明瞭である。特に電子・光デバイス設計に重要な電子有効質量が混晶系では明らかになっていない。そこで本研究では RS-Mg_xZn_{1-x}O の電子有効質量を第一原理計算に基づいて推定することを目的とした。

RS-Mg_xZn_{1-x}O の混晶のモデリングは 16 原子のスーパーセルで行った。原子配置は形成エネルギーを比較して安定な構造を決定した。その後、各組成における電子状態計算を密度汎関数理論に基づく第一原理計算、ならびに輸送係数計算を BoltzTrap によって行った。電子の有効質量はそれぞれ電気伝導により求める方法(m_c)と[2]、ゼーベック係数より計算する方法(m_s)を使用した[3]。

Fig. 1 に電気伝導から算出した電子有効質量(m_c)の Mg 組成依存を示す。 m_c は RS-ZnO から RS-MgO までほぼ単調に増加する傾向があり、Vegard's 則でよい近似となる。一方、Fig.2 に示すゼーベック係数より求めた有効質量(m_s)は Mg 組成に対して増加傾向にあるが、Vegard's 則から外れる結果となった。しかし、いずれの手法でも Mg 組成による有効質量の変化分は概ね一致している。したがって、 m_c や m_s の変化分に注目することで、他のバンド曲率による有効質量なども混晶系において推定することが可能である。

[1] M. Ono *et al.*, J. Appl. Phys. **125**, 225108 (2019). [2] Z. M. Gibbs *et al.*, Npj Comput. Mater. **3**, 8 (2017). [3] S. D. Kang *et al.*, arXiv:1710.06896.

【謝辞】本研究の一部は科研費(20H00246)の援助を受けた。

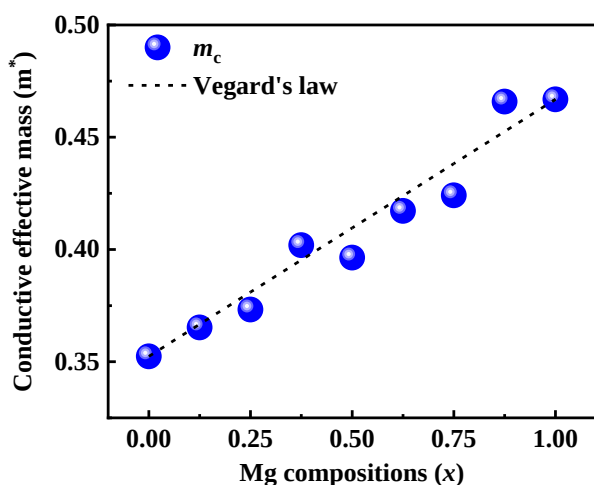


Fig.1 Conductive effective mass for RS-Mg_xZn_{1-x}O.

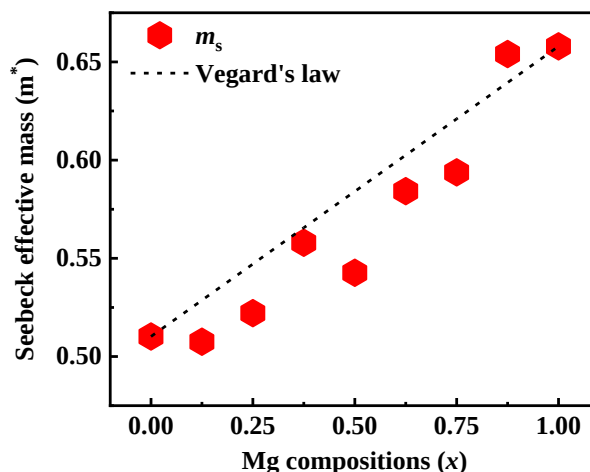


Fig.2 Seebeck effective mass for RS-Mg_xZn_{1-x}O.