Phasenstabilität und elektronische Bandstruktur von Kupferoxid

Researchers
Markus Heinemann and Bianca Eifert

Principal Investigator
Prof. Dr. Christian Heiliger

Project Term
2015 - 2015

Project Areas
Theoretical Condensed Matter Physics

Clusters
Skylla Cluster Gießen

Institute
I. Physikalisches Institut der JLU Gießen

University
Justus Liebig University Giessen

Introduction

Auf der Suche nach Materialien für zukünftige Anwendungen in Bereichen der Energiegewinnung und Elektronik stehen vor allem Materialsysteme im Fokus der Forschung, die sich durch ihre Nachhaltigkeit bezüglich Verfügbarkeit und Umweltverträglichkeit auszeichnen. In diesem Kontext steht auch die aktuelle Erforschung des Halbleitermaterials Kupferoxid. Dieses besitzt kristallographisch die Phasen Tenorit (Kupfer(II)- oxid), Cuprit (Kupfer(I)-oxid) und Paramelaconit. Alle drei Phasen lassen sich als Dünnschichten abscheiden[1] und zeigen aufgrund ihrer elektronischen Eigenschaften großes Potential für Anwendungen in verschiedenen Gebieten der Halbleitertechnologie. Diskutiert werden dabei vor allem Verwendungen in optoelektronischen Bauelementen wie zum Beispiel Leuchtdioden, als auch der Einsatz als nicht-toxisches Absorbermaterial in Solarzellen.

Methods

Voraussetzung für diese Anwendungen ist ein fundiertes Verständnis der elektronischen und optischen Eigenschaften. Am 1. Physikalischen Institut der JustusLiebig Universität Gießen wird zurzeit in Kooperation zwischen experimentellen und theoretischen Forschern versucht, Kupferoxid diesbezüglich zu charakterisieren. Obwohl Kupferoxid schon lange bekannt ist, sind immer noch viele wichtige Eigenschaften insbesondere von Tenorit und Paramelaconit unzureichend geklärt. Von zentraler Bedeutung für viele Eigenschaften ist die elektronische Bandstruktur der Kristalle. Diese beschreibt das Verhalten der Elektronen in dem kristallinen Festkörper. Durch sie ist also

JUSTUS-LIEBIG-UNIVERSITÄT GIESSEN
TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT
UNIKASSEL VERSITÄT
Philipps Universität Marburg

bspw. festgelegt, ob es sich um ein leitendes, halbleitendes oder isolierendes Material handelt. Auch optische Eigenschaften des Festkörpers werden durch sie bestimmt. Sie legt fest, wie ein Material sich unter Lichteinstrahlung verhält und man kann verstehen, warum zum Beispiel verschiedene Farben des Lichts unterschiedlich stark absorbiert werden.

Physikalisch handelt es sich dabei um eine quantenphysikalische Eigenschaft des Festkörpers, die sich im Kristall aus der Wechselwirkung der Elektronen untereinander und mit den Atomkernen ergibt. Ziel dieses Projektes ist es, die Wechselwirkungen in Kupferoxid auf fundamentaler quantenmechanischer Ebene zu beschreiben und ab initio computergestützt zu berechnen, das heißt, ohne dass Parameter aus dem Experiment einfließen. Methodisches Mittel der Wahl ist die Dichtefunktionaltheorie, mit welcher sich das komplexe Vielteilchenproblem so beschreiben lässt, dass es sich mit Hochleistungsrechnern berechnen lässt. Für die Rechnungen in diesem Projekt wurde dabei das Software-Paket VASP [2] eingesetzt.

Results

Zunächst wurden die strukturellen Eigenschaften des Materialsystems untersucht, speziell die Frage, unter welchen Bedingungen bezüglich Druck und Temperatur die drei Kupferoxidphasen stabil existieren. Das berechnete Phasendiagramm stimmt sehr gut mit experimentellen Ergebnissen überein und deutet darauf hin, dass es sich bei der Mischphase Paramelaconit um eine metastabile Phase handelt.[3] Bei der Berechnung der elektronischen Eigenschaften zeigte sich, dass die üblichen Standard-Näherungen bei Dichtefunktionaltheorie-Rechnungen nicht ausreichend sind, um die Bandstruktur korrekt zu beschreiben. Insbesondere die Bandlücke wird unter Verwendung dieser Näherungen falsch beschrieben. Um sie und damit die Eigenschaften als Halbleiter der drei Materialien korrekt zu beschreiben ist es daher nötig, rechnerisch zum Teil sehr aufwendige Verfahren einzusetzen.Verschiedene solcher Verfahren wurden im Rahmen des Projektes untersucht und miteinander verglichen. Die Ergebnisse weisen darauf hin, dass es sich bei Paramelaconit und Tenorit um Halbleiter mit indirekter Bandlücke im Bereich von 1,3 – 1,4 eV handelt, während Cuprit eine direkte Lücke von etwa 2 eV hat.

Outlook

Zusammenfassend wurden im vorliegenden Projekt die strukturellen und elektronischen Eigenschaften des Halbleitermaterialsystems Kupferoxid mit Hilfe von computergestützten Rechnungen beschrieben. Unter Nutzung dieser Ergebnisse lassen sich weiterführend optische Eigenschaften wie z. B. das Absorptionsverhalten bestimmen.

Reference

[1] B.K. Meyer, A. Polity, D. Reppin, M. Becker, P. Hering, P. J. Klar, T. Sander, C. Reindl, J. Benz, M. Eickhoff, C. Heiliger, M. Heinemann, J. Bläsing, A. Krost, S. Shokovets, C. Müller, and C. Ronning (2012): Binary copper oxide semiconductors: From materials towards devices. Phys. Status Solidi B 249, 1487. https://doi.org/10.1002/pssb.201248128

[2] Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) http://vasp.at

[3] M. Heinemann, B. Eifert, and C. Heiliger (2013): Band structure and phase stability of the copper oxides Cu2O, CuO, and Cu4O3. Phys. Rev. B 87, 115111. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.115111

Last Update: 2022-09-02 11:06