

## 密度汎関数法を用いたITO系透明導電膜の導電性の解析

○大島 正人、板橋 宏樹、上野 麻衣子、小林 茜  
東京工芸大学工学部（〒243-0297 神奈川県厚木市飯山 1583）

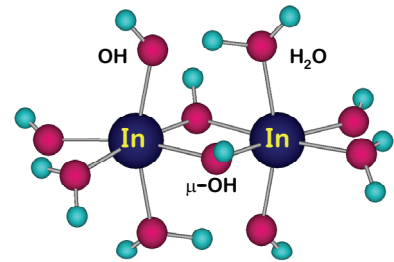
### 【緒言】

透明導電膜は液晶ディスプレイ等の電極として用いられており、概ね比抵抗が  $1 \times 10^{-3} \Omega \cdot \text{cm}$  以下で厚さは  $1 \mu\text{m}$  よりも薄い。代表的な材料として酸化インジウムに、インジウム原子に対して 5 atom% 程度のスズ原子を添加した ITO (Indium Tin Oxide) が実用化されている。酸化インジウム結晶の単位格子には In 原子が 32 個含まれ、それぞれの In 周りには 6 個の酸素原子が結合しており、これにスズを加えた ITO は In 原子の位置に Sn 原子が置換した構造をしている。

理論計算による検討はクラスターモデルを用い、DV-X $\alpha$ 法でバンドギャップを計算した結果が報告されているが、導電性について十分な解析はなされていない。本研究では 2~4 核の複核錯体モデルを用い、より精度の高い密度汎関数法により導電性について解析したので報告する。

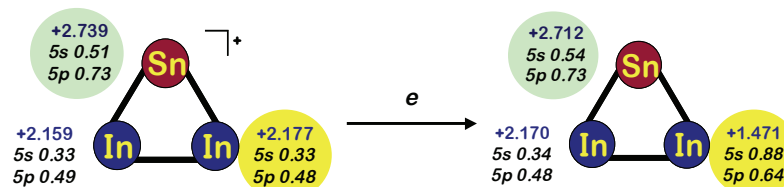
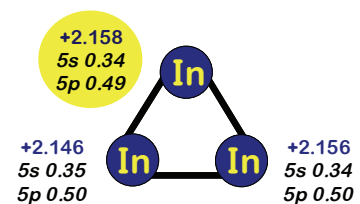
### 【方法】

複核錯体モデルは以下のように作成した。右図のようにインジウム原子の周囲に酸素原子を 6 個配置し、インジウム原子間は酸素原子で架橋した。さらにインジウムが +3 価で全体が中性になるようにプロトンを配置した。プロトンの配置により、いくつかの異性体が考え得るので、それらのすべてを密度汎関数法 (B3LYP-LANL2DZ) で構造最適化し、最安定構造を求めた。次に一方の In(III) を Sn(IV) に換え、構造最適化を行って ITO のモデル錯体とした。さらに 3~4 核のモデル錯体も同様に作成した。得られたモデル錯体の HOMO、LUMO のエネルギーレベル、分子軌道の形状、NBO による電荷の分布等を求め、それらのデータをもとに解析を行った。



### 【結果】

NBO による Natural Charge, Natural Electron Configuration の結果はインジウム 3 核錯体モデルの場合、右図のように In 上の Natural Charge が +2.158、で Natural Electron Configuration は 5s が 0.34、5p が 0.49 になった。ITO に相当するカチオン性モデルでは Sn 上の Natural Charge が +2.739 と増しており、正孔に相当する正電荷は大部分 Sn 上に局在することが分かった。



次に正孔に電子が移動してきたことを想定して、左式のようにカチオン性モデル錯体に 1 電子を加えたモデル錯体を検討したところ、添加した 1 電子は Sn 上ではなく、In 原子

上の電荷を減少させることがわかった。Sn と同族の Ge, Pb を用いた検討ではそれぞれ Ge, Pb の電荷を減少させることから、このことは Sn-In の組み合わせの場合にのみ起きることが分かった。このことは Sn と In の軌道エネルギーのレベルが近接していることに起因していると考えられる。また、添加した Sn 上でなく、隣接する In が電子を受け取りやすくなることを良い導電性が得られることと関連付けて考察した。