化合物混晶半導体の電子状態の理論

日野篤,篠塚雄三

和歌山大学大学院システム工学研究科

Theoretical Study of Electronic Structure in Compound Alloy Semiconductors Atsushi Hino and Yuzo Shinozuka

Graduate School of Systems Engineering, Wakayama University, 930 Sakaedani, Wakayama 640-8510, Japan

Abstract

The electronic structures of a compound alloy semiconductor $A_{1-x}A'_xB$ are studied by coherent potential approximation (CPA). A one dimensional tight binding model is used. The random effects in odd (A or A') sites are included as the coherent potential Σ (*E*), which is assumed to be the same for all sites, and is self-consistently determined with the average Green's function. The metamorphosis of the energy density of states $\rho(E)$ and the optical absorption spectrum I(E) due to the creation of a Frenkel exciton by changing the concentration *x* is precisely discussed.

1. はじめに

一般に、混晶半導体A_{1-x}B_xでは、その物性値は半導体Aと半導体Bの組成比xにしたが う重み付き平均で与えられることが第一近似として予想される。例えばAl_xGa_{1-x}N混晶 (A=GaN, B=AIN)では組成xとともに光吸収端は単調連続的な変化を示す。しかし、V族 を置換したGaN_xP_{1-x}混晶(A=GaP, B=GaN)では、組成比依存性は線形から大きくずれ(大 きなband gap bowing)、未解決の謎となっている。本研究では、III-V族やII-VI族を念頭 に化合物半導体ABの一方の成分を混晶化したA_{1-x}A'_xB(xの値は任意)の電子状態を Coherent Potential Approximationを拡張して理論的に解析した。

2. 解析モデル

図1のように、A(A')原子とB原子が交互に並んだ1次元A_{1-x}A'_xB混晶モデルを考える。 奇数サイトをA原子またはA'原子が、それぞれ確率1-xまたはxでランダムに占有すると 仮定する(図1)。電子のsite energyをそれぞれ ε_A 、 ε_A '、 ε_B 、また最近接間transfer energy をt(=-1)とする。有限濃度のときは、ポテンシャルの乱れが生じてBlochの定理が使えな くなる。そこで、空間的に乱れたsite energy ($\varepsilon_A \neq \varepsilon_{A'}$)の効果を複素数のcoherent potential $\Sigma(E)$ として取り込む。A、A'、B原子がある特定の空間配置をもつ場合、一般に電子は 散乱を受けるが、配置に関する統計的平均を行うと散乱の効果は実質的にゼロになると いう条件のもとで、以下の手順にしたがって $\Sigma(E)$ および有効Hamiltonian H_{eff} を決める。



 Σ を未知数として有効ハミルトニアン H_{eff} はつぎのように表せる。

$$H_{eff} = \sum_{n=odd} \left| \phi_n \right\rangle \Sigma \left\langle \phi_n \right| + \sum_{n=even} \left| \phi_n \right\rangle \varepsilon_B \left\langle \phi_n \right| + \sum_{n=m} \sum_{m=odd} \left| \phi_n \right\rangle t_{nm} \left\langle \phi_m \right| \tag{1}$$

固有エネルギーは簡単に求まり、

$$E_{k}^{\pm} = \frac{1}{2} \left\{ \Sigma + \varepsilon_{B} \pm \sqrt{\left(\Sigma - \varepsilon_{B}\right)^{2} + 16t^{2}\cos^{2}k} \right\}$$
(2)

今回は、single site近似を用いて m=1 以外の奇数サイトの ε_A または ε_A 、をすべてcoherent potential $\Sigma(E)$ で置き換える。m=1 のサイトをAまたはA、が占有するときのグリーン関数は

$$F_{A}(z) = \left\langle \phi_{1} \right| \frac{1}{z - H_{eff} + V_{A}} \left| \phi_{1} \right\rangle = \frac{1}{F_{0}(z)^{-1} - (\varepsilon_{A} - \Sigma)}$$
(3)

$$F_{A}'(z) = \left\langle \phi_{1} \right| \frac{1}{z - H_{eff} + V_{A}'} \left| \phi_{1} \right\rangle = \frac{1}{F_{0}(z)^{-1} - (\varepsilon_{A}' - \Sigma)}$$
(4)

ここで

$$F_0(z) = \left\langle \phi_m \left| \frac{1}{z - H_{eff}} \right| \phi_m \right\rangle = \sum_{\pm k} \sum_k \frac{\left| C_m^{\pm} \right|^2}{z - E_k^{\pm}}$$
(5)

奇数サイトでは
$$C_m^{\pm} = \frac{\pm 2\sqrt{2t}\cos k}{\sqrt{N\left\{4t^2\cos^2 k + (\Sigma - E_k^{\pm})^2\right\}}}$$
 である。
よって、CPA 方程式は

$$F_{0}(z) = (1-x)F_{A}(z) + xF_{A}'(z)$$

$$F_{0}(z) = \frac{1-x}{F_{0}(z)^{-1} - (\varepsilon_{A} - \Sigma)} + \frac{x}{F_{0}(z)^{-1} - (\varepsilon_{A}' - \Sigma)}$$
(6)

式(2)、(5)、(6)を連立させることで $\Sigma(E)$ と $F_0(z)$ が求まり、それを用いるとエネルギー 状態密度 $\rho(E)$ が計算できる。

$$\rho(E) = \pi^{-1} \operatorname{Im} F_0(E - i0) \tag{7}$$

また、混晶内を動く素粒子として電子の代わりに Frenkel 励起子とみなしたときに、励起子生成に対応する光吸収スペクトル*I*(*E*)は次の式から計算することができる。

$$I(E) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{1}{E - E_{k=0}^{-}}$$
(8)

3. 結果

図 2-a、2-bは1 次元A_{1-x}A'_xB混晶の状態密度 $\rho(E)$ と光吸収スペクトルI(E)の計算結果で ある。 ϵ_B が ϵ_A と ϵ_A の間にある混晶(図 2-a)ではxが少量濃度(x=0.05)のとき、2つの host bandの上端にそれぞれA'不純物バンドが現れる(persistence type)。xが増えると (x=0.1, 0.25)不純物バンドは徐々に広がりそれぞれ下のhost bandに融合していく。x=0.5 付近ではすべてのbandが1つに融合する(amalgamation type)。さらにxが増えるとA不純 物バンドがupper host bandから分離してくる。一方、 ϵ_B が ϵ_A と ϵ_A の間にない混晶(図 2-b) では1つのhost bandとの間でのみ不純物バンドの分離と融合が生じる。励起子生成によ る光吸収スペクトルには、光学選択則のためk=0成分への強いピークが現れる。host band の下の部分に光吸収スペクトルが現れ、x(または1-x)の増加とともに幅が広がってく る。



図 2-a $\varepsilon_A=0$ 、 $\varepsilon_{A'}=1.5$ 、 $\varepsilon_B=1$ のときの状態密度 $\rho(E)$ と光吸収スペクトルI(E)



図 2-b $\varepsilon_A=1$ 、 $\varepsilon_{A'}=2$ 、 $\varepsilon_B=0$ のときの状態密度 $\rho(E)$ と光吸収スペクトルI(E)

図 3-a、3-bは2つのhost bandを価電子帯と伝導帯とみなしたときのバンドギャップ E_g の 組成比依存性である。 ε_B が ε_A と $\varepsilon_{A'}$ の間にある混晶(図 3-a)では、組成比依存性は線形 から大きくずれる。xが 0.5 から 0.9 の間ではすべてのbandが融合し $E_g=0$ となる。 ε_B が ε_A と $\varepsilon_{A'}$ の間にある混晶(図 3-b)では、組成比依存性は単調連続的な変化を示す。



4. 今後の課題

今回、Coherent Potential Approximationを拡張して1次元A_{1-x}A'_xB混晶の電子状態を理論的に解析した。今後は閃亜鉛鉱構造など3次元混晶に拡張する予定である。

参考文献

[1] Y. Shinozuka, Jpn. J. Appl. Phys. 45 (2006) pp. 8733-8739.