

# 化合物混晶半導体の電子状態の理論

原愛美、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

Manami Hara and Yuzo Shinozuka

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

## Abstract

The electronic structure of a compound alloy semiconductor  $A_{1-x}A'_xB$  are studied by coherent potential approximation (CPA). Tight binding model used. The random effects in odd(A or A') sites are included as the coherent potential  $\Sigma(E)$ , 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 absorption spectrum  $I(E)$  due to the creation of a Frenkel excion by changing the concentration,  $x$ , is precisely discussed.

### 1. はじめに

2つの物質 A と A'から成る混晶半導体  $A_{1-x}A'_xB$  の物性値は、その組成比  $x$  に従う重み付き平均で変化すると考えられる。実際に混晶化するとバンドギャップエネルギーが変化し、その結果、発光波長や吸収端のエネルギーが変化するが、その変化のしかたは単純ではない。本研究では、化合物半導体 AB の一方の成分を混晶化した  $A_{1-x}A'_xB$  混晶について ( $x$  の値は任意)、その電子状態を Coherent Potential Approximation を拡張して理論的に解析した。

### 2. 解析モデル

出発点として NaCl 型の結晶 AB を考え、その一方を混晶化した 3次元  $A_{1-x}A'_xB$  混晶モデルを考える。 $(n_x, n_y, n_z)$  格子上的  $n_x+n_y+n_z$  が奇数のサイトを 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。site energy をそれぞれ  $\epsilon_A, \epsilon_{A'}, \epsilon_B$  とし、最近接 transfer energy を  $t(=-1)$  とする。混晶では並進対称性がなくなるため Bloch の定理が使えなくなる。電子は乱れによって散乱されるが、配置に関する統計的平均を行い、散乱効果が消えるように仮想 potential  $\Sigma(E)$  を選び、有効 Hamiltonian  $H_{eff}$  を決める。つまりランダムな potential による多重散乱の効果を複素 potential  $\Sigma(E)$  として取り込む。

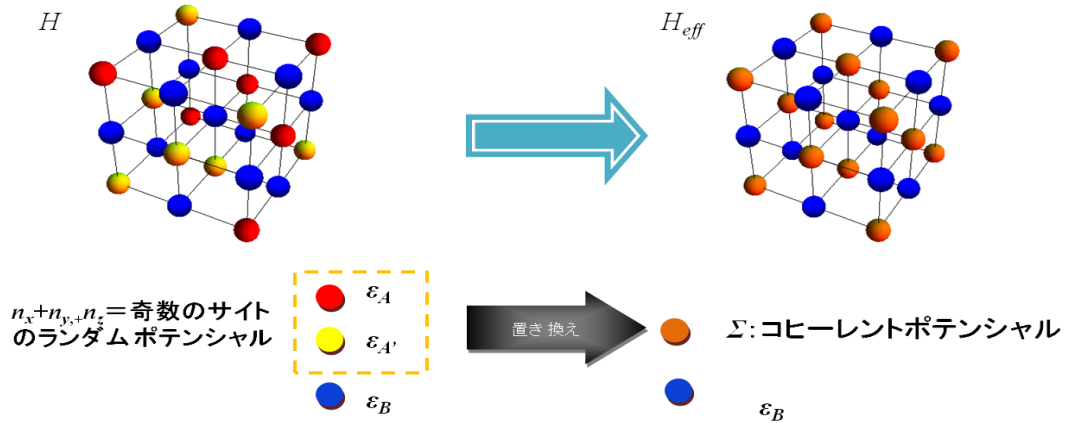


図1 3次元  $A_{1-x}A'_xB$  混晶モデル

$\Sigma$ を未知数として有効ハミルトニアン  $H_{eff}$ は次のように表わせる

$$H_{eff} = \sum_{n=odd} |\phi_n\rangle \Sigma \langle \phi_n| + \sum_{n=even} |\phi_n\rangle \varepsilon_B \langle \phi_n| + \sum_n \sum_m |\phi_n\rangle t_{nm} \langle \phi_m| \quad \dots (1)$$

固有エネルギーは簡単に求まり、

$$E_{(k_x, k_y, k_z)}^\pm = \frac{1}{2} \left\{ \Sigma + \varepsilon_B \pm \sqrt{(\Sigma - \varepsilon_B)^2 + 16t^2 (\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)^2} \right\} \quad \dots (2)$$

今回は奇数サイト  $(m_x, m_y, m_z) = (1, 1, 1)$ なので  $C_m$ は

$$C_a = \frac{\pm 2\sqrt{2}t(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)}{\sqrt{N_x N_y N_z \{4t^2 (\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)^2 + (\Sigma - E)^2\}}} \text{である。} \quad \dots (3)$$

single site 近似を用いて  $(m_x, m_y, m_z) = (1, 1, 1)$ 以外の奇数サイトの  $\varepsilon_A$  または  $\varepsilon_{A'}$ をすべて coherent potential  $\Sigma(E)$ で置き換える。 $(m_x, m_y, m_z) = (1, 1, 1)$ 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

$$F_A(z) = \left\langle \phi_{(1,1,1)} \left| \frac{1}{z - H_{eff} + V_A} \right| \phi_{(1,1,1)} \right\rangle = \frac{1}{F_0(z)^{-1} - (\varepsilon_A - \Sigma)} \quad \dots (4a)$$

$$F_{A'}(z) = \left\langle \phi_{(1,1,1)} \left| \frac{1}{z - H_{eff} + V_{A'}} \right| \phi_{(1,1,1)} \right\rangle = \frac{1}{F_0(z)^{-1} - (\varepsilon_{A'} - \Sigma)} \quad \dots (4b)$$

ここで

$$F_0(z) = \left\langle \phi_{(m_x, m_y, m_z)} \left| \frac{1}{z - H_{eff} + V_{A'}} \right| \phi_{(m_x, m_y, m_z)} \right\rangle = \sum_{\pm} \sum_{k_x} \sum_{k_y} \sum_{k_z} \frac{|C_{(m_x, m_y, m_z)}^\pm|}{z - E_{k_x, k_y, k_z}^\pm} \quad \dots (5)$$

よって、CPA 方程式は

$$F_0(z) = (1-x)F_A(z) + xF_{A'}(z)$$

$$F_0(z) = \frac{1-x}{F_0(z)^{-1} - (\varepsilon_A - \Sigma)} + \frac{x}{F_0(z)^{-1} - (\varepsilon_{A'} - \Sigma)} \quad \dots (6)$$

式(5)、(6)を連立させることで  $\Sigma(E)$  と  $F_0(z)$  が求まる。得られた Green 関数  $F_0(z)$  と  $\Sigma(E)$  を用いて、エネルギー状態密度  $\rho(E)$  と、混晶内を動く素励起を電子ではなく Frenkel 励起子とみなしたときに Frenkel 励起子生成に対応する光吸収スペクトル  $I(E)$  を求めることができる。

$$\rho(E) = \pi^{-1} \text{Im} F_0(E - i0) \quad \dots (7)$$

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

### 3.結果

NaCl 型 3 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  $I(E)$  を 図 2-1、図 2-2 に示す。 $\varepsilon_B$  が  $\varepsilon_A$  と  $\varepsilon_{A'}$  の間にある混晶(図 2-1)では  $x$  が少量濃度のとき、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)。  $x$  を増やすと不純物バンドが upper host band から分離してくる。 $\varepsilon_B$  が  $\varepsilon_A$  と  $\varepsilon_{A'}$  の間でない混晶(図 2-2)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。

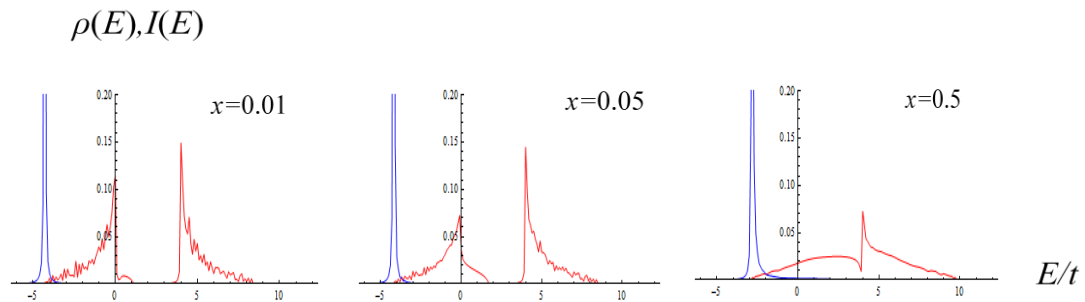


図 2-1  $\varepsilon_A=0$ 、 $\varepsilon_{A'}=6$ 、 $\varepsilon_B=4$  のときの状態密度  $\rho(E)$  と光吸収スペクトル  $I(E)$

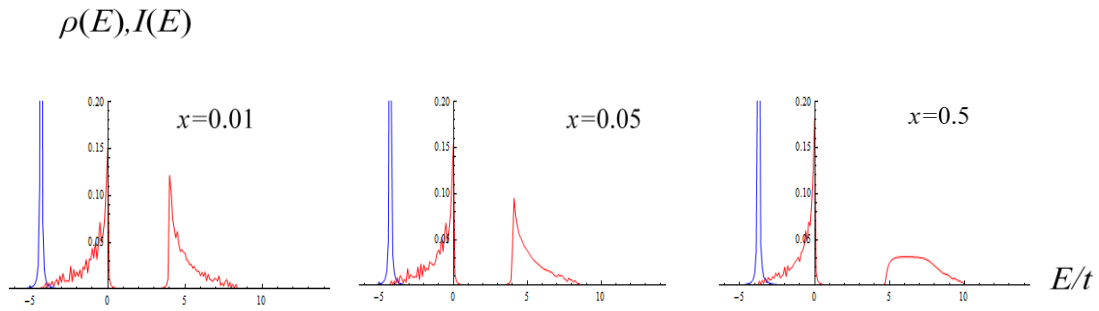


図 2-2  $\epsilon_A=4$ 、 $\epsilon_{A'}=8$ 、 $\epsilon_B=0$  のときの状態密度  $\rho(E)$  と光吸収スペクトル  $I(E)$

図 3-1、図 3-2 は 2 つの host band を価電子帯と伝導帯とみなしたときの  $E_g$  組成比依存性である。 $\epsilon_B$  が  $\epsilon_A$  と  $\epsilon_{A'}$  の間にある混晶(図 3-1)では、組成比依存性は線形から大きくずれる。site energy の差があっても小さければすべての band が融合し  $E_g=0$  となる。 $\epsilon_B$  が  $\epsilon_A$  と  $\epsilon_{A'}$  の間にある混晶(図 3-2)では、組成比依存性は単調連続的な変化を示す。

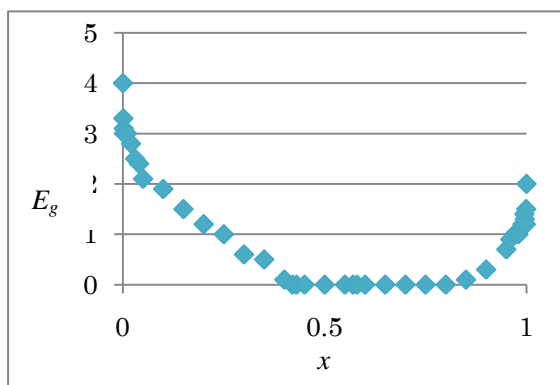


図 3-1  $\epsilon_A=0$ 、 $\epsilon_{A'}=6$ 、 $\epsilon_B=4$  のときの  $E_g$  の組成比  $x$  依存性

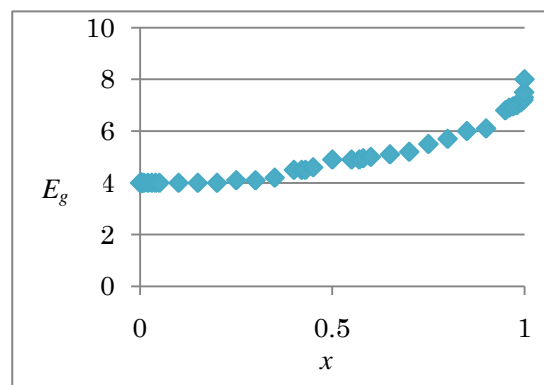


図 3-2  $\epsilon_A=4$ 、 $\epsilon_{A'}=8$ 、 $\epsilon_B=0$  のときの  $E_g$  の組成比  $x$  依存性

#### 4. 今後の課題

今回は出発点として NaCl 型の結晶 AB を考え、その一方を混晶化した 3 次元  $A_{1-x}A'_xB$  混晶について Coherent potential Approximation を拡張して、電子状態を理論的に解析した。今後はより現実的なグラファイト構造や zincblende 構造についてその電子状態を理論的に解析していく予定である。