

第一原理計算による GaAsN 混晶の伝導帯の解析に関する研究

First Principles Study on the Conduction Band Electron States of GaAsN alloys

埼玉大院理工¹, °坂本 圭¹, 矢口 裕之¹,

Saitama Univ.¹, °K. Sakamoto¹ and H. Yaguchi¹

E-mail: sakamoto@opt.ees.saitama-u.ac.jp

【はじめに】

GaAsN 混晶は、低 N 濃度領域において、N 濃度増加に伴いバンドギャップエネルギーが著しく減少する巨大バンドギャップボウイングという特異な性質を持っている。このため、高性能レーザーダイオードや高効率太陽電池への応用が期待される半導体材料である。これまで GaAsN 混晶における電子の有効質量についてはエレクトロリフレクタンス(ER)法^[1]や光検知サイクロトロン共鳴(ODCR)法^[2]などの方法により研究されてきたが、研究者によって報告された結果大きく異なり、未だ結論が得られていない。

本研究では、GaAsN 混晶における電子の有効質量の N 濃度依存性を第一原理計算によって解析した。

【計算方法・結果】

本研究では、スーパーセル法を利用して GaAsN 混晶の電子有効質量の N 濃度依存性を調べた。用いたスーパーセルは GaAs 中の As 原子を一部 N 原子に置換した構造である。

計算には、構造緩和に線形スケーリング法第一原理計算プログラムを、電子構造計算にはフルポテンシャル線形化補強平面波(FLAPW)法第一原理計算プログラムを用いた。電子の有効質量は、伝導帯の Γ 点近傍の図 1 に示すような E-k 分散を精度良く調べることで算出した。

図 2 に示すように N 濃度 0.8% の GaAsN 混晶では電子の有効質量は GaAs のおよそ 2 倍になることがわかった。また、計算した全 N 濃度において GaAsN 混晶の有効質量は常に GaAs よりも大きい。N 濃度増加に伴い減少する傾向があることがわかった。これらの結果は ER 法による実験結果^[1]を定性的に支持するものとなった。また、本研究の結果は電子の有効質量は GaAsN においては N 濃度増加に対して連続的に変化するが、GaAs から GaAsN へは不連続性を示しており、これは GaAsN 混晶の伝導帯形成についての重要な知見を示すものであるものと考えられる。

【参考文献】

[1] Y. Zhang et al., Phys. Rev. B **61**, 7479-7482 (2000)

[2] P. N. Hai et al., Appl. Phys. Lett. **77**, 1843 (2000)

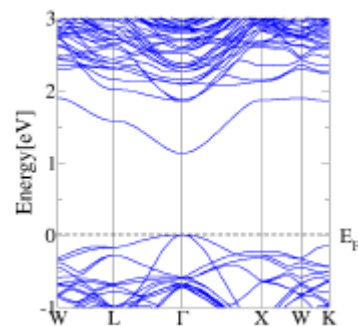


図 1. GaAsN (N=1.25%) の E-k 分散

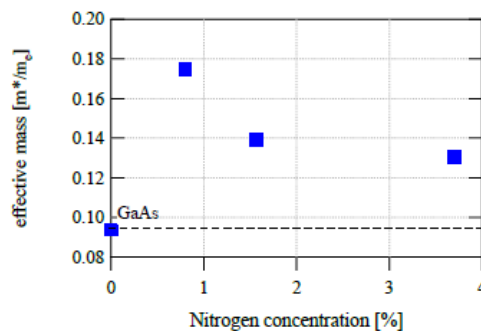


図 2. 有効質量の N 濃度依存性