

第一原理計算による GaPN 混晶の電子構造解析

First-principles calculation of the electronic structure of GaPN alloys

埼玉大学 ○齋藤 誠, 坂本 圭, 矢口 裕之

Saitama Univ. ○Makoto Saito, Kei Sakamoto, Hiroyuki Yaguchi

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

【はじめに】III-V-N 混晶は、低窒素濃度域でバンドギャップが減少する巨大バンドギャップボウイングという特徴的な性質を有することから、従来の材料系では実現の難しい光デバイスを作製可能とする半導体材料として期待されている。これまで、我々は III-V-N 混晶の一つである GaAsN 混晶について窒素原子配置が電子構造にどのように影響するのかを第一原理計算によって解析した[1]。GaPN 混晶も III-V-N 混晶の一つであるが、GaP が間接遷移型であり、孤立した窒素原子が GaP のバンドギャップ内に準位を形成することなどから、その電子構造には興味深い点がある。そこで今回は GaPN の電子構造について第一原理計算による解析を行った。

【計算方法】リニアスケール密度汎関数プログラム SIESTA を用いて体積・原子座標の最適化を行った後、全電子密度汎関数プログラム WIEN2k を用いて電子構造の解析を行った。計算には GaP 中の P 原子の一部を N 原子で置換したスーパーセルを利用した。

【結果】Fig. 1 に $5 \times 5 \times 5$ スーパーセル中の面心位置に N 原子を配置した構造(窒素濃度 0.8%)に対して計算したバンド構造を示す。計算結果から、この窒素濃度の GaPN は直接遷移型となることがわかる。また、最低伝導帯(LCB)は、逆格子空間全域で第二伝導帯(SCB)と重ならないことがわかる。Fig. 2 に LCB の最低及び最高エネルギーと SCB の最低エネルギーの計算結果を示す。Fig. 1 に示したように窒素濃度 0.8%では LCB と SCB にはバンドの重なりはないが、1.56%では重なりが生じることがわかる。この結果は、band anticrossing (BAC)モデルから求まる GaPN 混晶のバンドエネルギー[2]とは全く一致せず、III-V-N 混晶の電子構造を考える上で重要な知見が得られた。講演では吸収係数や各原子のバンド形成への寄与などについての考察も紹介する。

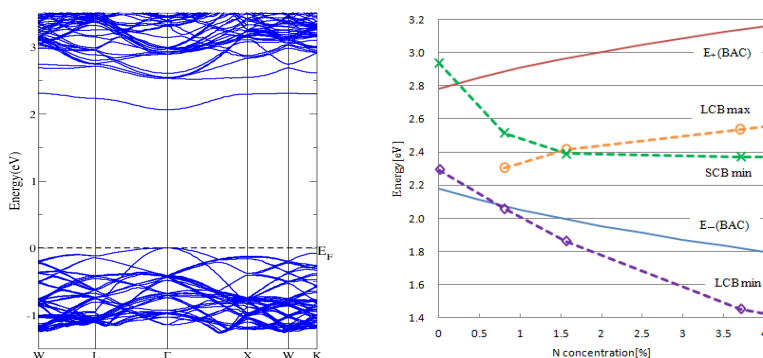


Fig. 1 Calculated band structure of GaPN (N=0.80%). Fig. 2 Calculated band energies of GaPN.

[1] K. Sakamoto and H. Yaguchi, 31st Int. Conf. Phys. Semicon. (2012).

[2] W. Shan *et al.*, Appl. Phys. Lett. **76**, 3251 (2000).