19p-PB6-26

混晶半導体の電子状態に対する新しい計算法：IQB

Interacting Quasi Band Model for Electronic States in Alloy Semiconductors

和歌山大システム工 [1]　○篠塚雄三

Wakayama Univ. [1],　°Yuzo Shinozuka

E-mail: yuzo@sys.wakayama-u.ac.jp

【はじめに】　GaN_xAs_{1-x} などの混晶半導体は、成分原子がランダムに配置するため並進対称性を持たない。したがって Bloch の定理が使えないため、電子状態の計算は固体物理学における古くからの難題となっている。これまで提案されている理論方法は大別して２種類あり、一つは数 10 原子からなる super cell（その中に組成比に応じて原子を乱雑に並べる）を仮定し、同一の super cell を規則正しく並べて疑似並進対称性を復活し band 計算を行う方法である。もう一つは tight binding model を採用し、Green 関数を用いて乱れによる散乱効果を取り込んでいく方法である。しかし、両者とも一長一短である。今回、これらとは全く別の角度からの混晶の電子状態を計算する方法を考案した。乱れの種類と強さを問わず一般的な混晶に適用できるその新手法[1]の概要と特徴を以下に紹介する。

【モデル・理論】　置換型２元混晶 $A_{cA}B_{cB}$（$c_A+c_B=1$）を対象に次の tight binding model を考える。

$$H=\sum_n |n\rangle\varepsilon_n\langle n|+\sum_n\sum_m |n\rangle t_{nm}\langle m| \tag{1}$$

ここで $|n\rangle$ はサイト n の Wannier state である。diagonal randomness $\varepsilon_n=\varepsilon_A$ or ε_B および off-diagonal randomness $t_{nm}=t_{nm}^{AA},t_{nm}^{AB},t_{nm}^{BA},t_{nm}^{BB}$ の両方を考慮する。次に quasi 波数 k の電子状態として

$$|\tilde{\psi}_k\rangle=1/\sqrt{N}\sum_n \beta_n \exp[\mathrm{i}kn]|n\rangle \tag{2}$$

を仮定し、変分パラメター β_n はサイト n が A 原子か B 原子かで β_A か β_B のどちらかを取るものとする。Hamiltonian (1)の期待値を求め原子配置の統計平均を行い（ただし相関は全て無視）、条件 $\langle\tilde{\psi}_k|\tilde{\psi}_k\rangle=1$ のもとで β_A と β_B について変分することで、以下の式が得られる。ここで t_k^{ij} は t_{nm}^{ij} のフーリエ変換である。

$$\begin{pmatrix}\varepsilon_A+c_At_k^{AA}-E & c_Bt_k^{AB}\\ c_At_k^{BA} & \varepsilon_A+c_Bt_k^{BB}-E\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\beta_A\\ \beta_B\end{pmatrix}=0 \tag{3}$$

つまり２つの quasi band $\varepsilon_A+c_At_k^{AA}$ と $\varepsilon_B+c_At_k^{BB}$ が相互作用をしているという描像となる。その結果

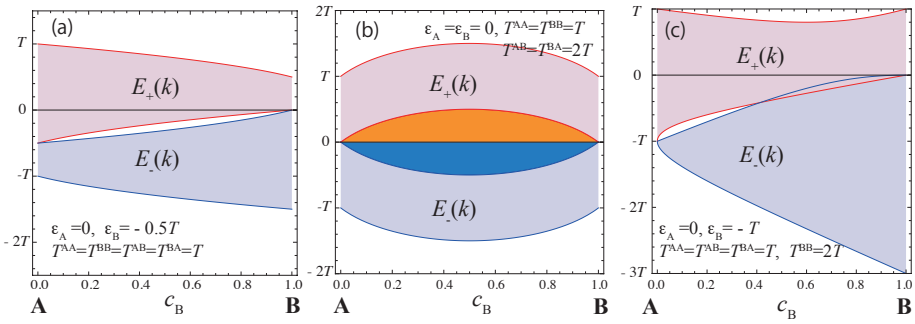
$$E_\pm(k)=\frac{1}{2}\left\{\varepsilon_A+\varepsilon_B+c_At_k^{AA}+c_Bt_k^{BB}\pm\sqrt{(\varepsilon_A+c_At_k^{AA}-\varepsilon_B-c_Bt_k^{BB})^2+4c_Ac_Bt_k^{AB}t_k^{BA}}\right\} \tag{4}$$

が得られる（Interacting Quasi Band (IQB) Model）。

【計算結果】　右図に電子エネルギーの組成依存性の計算例を示す。IQB model は以下の特徴をもつ。

1) randomness の種類と強さを問わず、任意の混晶に適用でき、電子状態の組成による変化の全容が得られる。

2) パラメータの値に応じて正負、大小の band bowing が出現する。



3) 一方の組成が小さい希薄混晶の場合、いわゆる Band Anticrossing Model [2]と類似の結果を与える。ただし(3)式の非対角項の組成依存性が異なるなど、詳細は異なる。

4) diagonal randomness の場合、Average t-matrix Approximation と同一のエネルギー状態密度を与える。

【参考文献】[1] Y. Shinozuka, APEX in press.　[2] W. Shan, W. Walukiewicz, *et al*. PRL **82**, 1221 (1999).

© 2014 年　応用物理学会