

# Screened-exchange 密度汎関数計算による III-V 化合物半導体多形の電子状態 Screened-exchange density functional calculations of III-V semiconductor polytypes

三重大院工, ○秋山 亨, 中村浩次, 伊藤智徳

Mie University, ○Toru Akiyama, Kohji Nakamura and Tomonori Ito

E-mail: akiyama@phen.mie-u.ac.jp

【はじめに】半導体ナノワイヤは次世代ナノデバイスの構成要素として注目されており、その形状および構造制御が可能となってきた。近年、バルク状態において最安定な閃亜鉛鉱(ZB)構造では間接遷移型のバンド構造を持つGaPにおいて、ウルツ鉱(WZ)構造となるGaPナノワイヤからの直接遷移型の発光が確認され[1]、WZ構造GaPナノワイヤの光デバイスへの応用が注目されている。一方、これまでの密度汎関数計算によると、WZ構造をとるIII-V化合物半導体はすべて直接遷移型の半導体となる報告[2]もあるものの、GaPおよびAlSbにおいてWZ(ZB)構造で直接(間接)遷移型の半導体となる報告[3]もあり、構造多形と電子状態(直接遷移型あるいは間接遷移型半導体)との関係性については不明な点が多い。そこで本研究では、実験結果を良く再現することが報告されているFLAPW法にもとづくscreened-exchange密度汎関数計算[4]を実行し、III-V化合物半導体多形における構造多形とバンド構造との関係性を検討する。

【結果および考察】Screened-exchange 密度汎関数計算の結果、GaP, AlP, AlAs および AlSb において直接遷移型の半導体となるのは WZ 構造の GaP および AlSb のみであり、他の構造多形(ZB, 6H および 4H 構造)においてはこれら III-V 化合物半導体は間接遷移型となることがわかった。図は screened-exchange 密度汎関数計算によって得られた、WZ 構造における III-V 化合物半導体のバンド構造を示したものであり、WZ 構造の GaP および AlSb では $\Gamma$ 点において価電子帯上端(VBM)および伝導帯下端(CBM)となる直接遷移型の半導体となることがわかる。WZ 構造の GaP および AlSb において直接遷移型の半導体となるのは、ZB 構造における[111]方向(WZ 構造における[0001]方向)の積層順の変化に伴い、 $\Gamma$ 点付近の伝導帯バンドのエネルギーが低下し、ZB 構造において CBM となる X 点(六方晶ブリルアンゾーンでの M 点に対応する)近傍のバンドに比べて低くなることに起因している。一方、WZ 構造の AlP および AlAs においても $\Gamma$ 点近傍の伝導帯バンドのエネルギーは低下するものの、M 点付近の伝導帯バンドよりは高く、間接遷移型の半導体となる。これらの結果は、 $\Gamma$ 点および X 点近傍における伝導帯バンドの位置関係が III-V 化合物半導体の電子状態を決定するうえで重要であることを示唆している。講演では WZ 構造での AlGaP および AlGaAs の電子状態についても議論する。

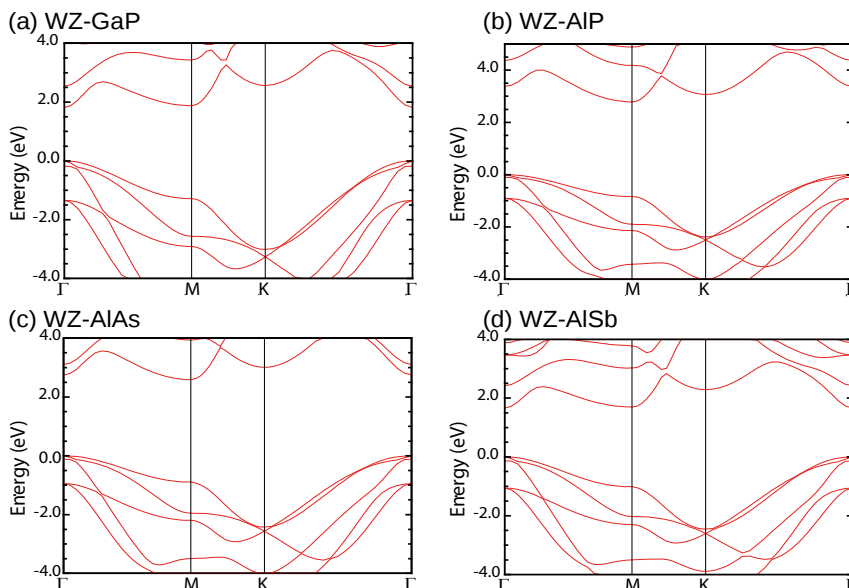


FIG.: Electronic band structures of (a) WZ-GaP, (b) WZ-AlP, (c) WZ-AlAs, and (d) WZ-AlSb obtained by the screened-exchange density functional calculations. The energy of valence band maximum is set zero. M point in the hexagonal Brillouin zone (BZ) corresponds to X point in the cubic BZ.

【参考文献】 [1] S. Assali et al.: Nano Lett. **14** (2013) 1559. [2] A. Belabbes et al.: Phys. Rev. B **86** (2012) 75208. [3] A. De et al.: Phys. Rev. B **81** (2010) 155210. [4] R. Asahi et al.: Phys. Rev. B **59** (1999) 7486.