

第一原理計算によるII-VI族化合物半導体の酸素ドーピングの光学特性の解析

First-principles theoretical study of optical properties of oxy-gen-doped II-VI semiconductors

千葉大学 理学部物理¹ ○石川 真人¹, 中山 隆史¹

Department of Physics, Chiba Univ¹ ○Masato Oubuts¹, Hanako Oubutsu²

E-mail: masatoi4854@gmail.com

【背景・目的】 III-V 族半導体に窒素をドーピングするとバンド構造はリダクション(縮む)を起こすことが実験的・理論的に知られているが、近年の研究によって II-VI 族化合物半導体に酸素をドーピングしても同様な現象が見られることが報告されている[1-5]。 II-VI 族半導体はワイドギャップ材料として光デバイスへの応用が期待されており、特に酸素ドーピングした ZnTe は太陽電池の研究が行われている。 これまでに酸素ドーピング理論的研究はバンド構造の解析は行ったが、酸素原子の結晶配置の安定性や光学特性については不明のままである。 そこで本発表では酸素ドーピングによる系の安定性比較や光学特性のメカニズムについて理論的に解析を行った。

【方法】 数値計算は密度汎関数法に基づいた第1原理計算を使用した。計算で使用した結晶のモデルはII族原子を 32 個,VI 族原子 32 個の計 64 個から構成されるジンクブレンド構造である。

II 族原子には Zn を使用するが d 電子系を考慮して価電子数を 10 (=2+8) にして計算を行う。 VI 族原子にはバンド構造の異なる Se、と Te を用いて光学吸収スペクトル ϵ_2 の比較を行った。 酸素原子の配置位置の安定性では酸素原子を結晶内で近接と離れて配置した場合で比較を行った[6]。

【結果】 酸素ドーピングによる光学特性の結果、ZnTe ではバンドギャップ間に酸素が局在する構造を反映して、酸素のエネルギー準位とバルクの準位のそれぞれに吸収の立ち上がりを確認できる。この結果は実験結果と同じ傾向であり、また III-V 族の間接遷移型の GaP に窒素ドーピングした結果と同じ傾向を示すことが分かった。 ZnSe でもバンド構造を反映して伝導帯バンド内に吸収の立ち上がりを確認できるが、同じバンド構造の III-V 族の InP のようになピークは見られない。この理由として、酸素のエネルギー順位と ZnSe の伝導帯の下端の準位とに差があるため吸収が重ならなかったと推測される。 また酸素の安定位置の比較では原子間距離が離れた方が安定する傾向があり、分子状態でドーピングされる可能性が低いことが分かった。さらに発表ではドーピングで用いる軽原子を V 族の窒素、VII 族のフッ素にした場合の計算結果についても報告する。

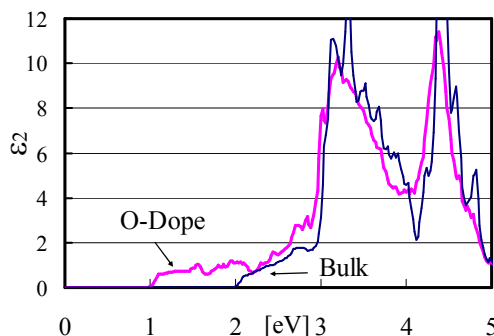


図1. ZnTe 酸素ドーピングの光学吸収スペクトル ϵ_2

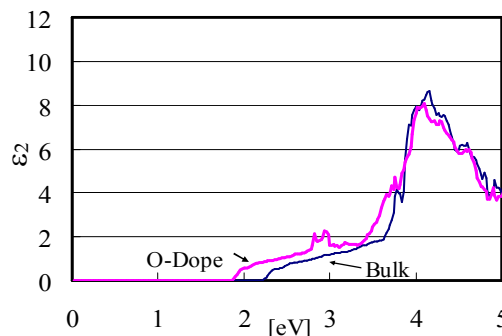


図2. ZnSe 酸素ドーピングの光学吸収スペクトル ϵ_2

[1] P. R. C.Kent, A. Zunger :Phys.Rev.B 64, 115208 (2001).[2] M.Ishikawa et al, Phys.St.Solidi C8, 352 (2011).[3] H.Yaguchi, et.al, J.Crystal Growth 189/190(1998)49.[4]T. Tanaka et al. Jpn. J. Appl. Phys. 50 (2011) 082304.[5]W. Waluciewicz et al, Phys.Rev Lett.91.Vol.24.246403(2003) [6]M.Ishikawa, et.al Phys.Status Solidi C 10, No.11,1385 (2013)