

混晶化合物半導体の電子状態計算：IQB model の拡張

Extension of IQB Model to Electronic States in Compound Alloy Semiconductors

和歌山大システム工¹ ○篠塚雄三, 小田将人

Wakayama Univ.¹, ○Yuzo Shinozuka and Masato Oda

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

【はじめに】 混晶化は物性値を連続的に変化させるための重要な手法である。しかし、混晶では原子配列のランダムさのため Bloch の定理が成り立たないことがネックとなり、全てに満足できる電子状態の理論はまだ得られていない (super cell を用いる第一原理計算、tight binding model を用いる CPA などどれも一長一短である)。今後、混晶という特異性を十分に理解し応用を図るためには、仮想結晶近似を超えた指導指針が望まれる。前回、従来の理論とは異なる角度から混晶の電子状態を計算する Interacting Quasi Band (IQB) model を提案した[1, 2]。波動関数の局所振幅を構成原子に呼応して変動させる、この新手法は、乱れの種類と強さ、組成比の値を問わず (single band の範囲内で) 一般的な混晶に適用できる。今回は応用上重要となる化合物半導体 (multi band) への拡張を試みた。

【モデル・理論】 対象：III-V (II-VI)族半導体を混晶化した置換型3元混晶 $A_{c_A}B_{c_B}D$ ($c_A+c_B=1$)。

結晶構造：zincblende (単位胞内に2個の原子) あるいは wurzite (単位胞内に4個の原子)。

電子基底：価電子帯と伝導帯の変化と相関が同一枠組内で導出可能となる sp^3s^* model [3]を採用。

変分関数：混晶中の電子は、乱れた原子配列に呼応した quasi 波数 \vec{k} の電子状態をとると仮定する。

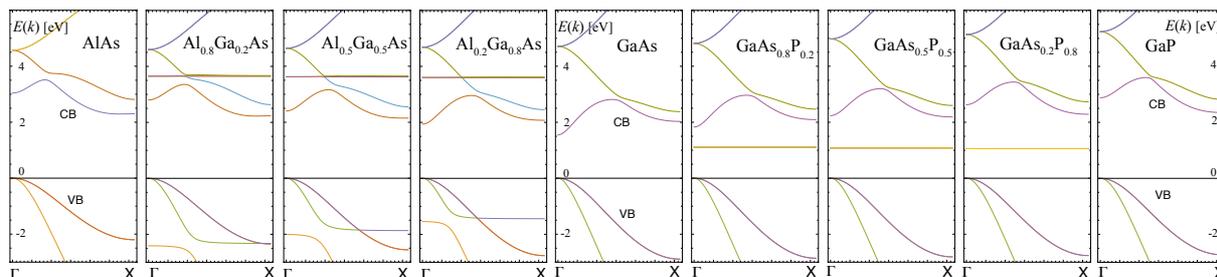
$$|\tilde{\psi}_{\vec{k}}\rangle = N^{-1/2} \sum_{\vec{R}} \sum_i \sum_{\sigma} \exp[i\vec{k}(\vec{R} + \vec{\tau}_i)] \beta_{i,\sigma} |\phi_{i,\sigma}\rangle \quad (1)$$

ここで \vec{R} は単位胞の位置、 $\vec{\tau}_i$ は単位胞内の i 番目の原子の位置、 $|\phi_{i,\sigma}\rangle$ はその σ 型原子軌道 ($\sigma=s, px, py, pz, s^*$)。変分パラメータ $\beta_{i,\sigma}$ はサイト i が A 原子か B 原子かで $\beta_{A,\sigma}$ か $\beta_{B,\sigma}$ のどちらかを取るとする。

手順：Hamiltonian 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する)、条件 $\langle \tilde{\psi}_{\vec{k}} | \tilde{\psi}_{\vec{k}} \rangle = 1$ のもとで $\beta_{A,\sigma}^*$ と $\beta_{B,\sigma}^*$ および他の $\beta_{i,\sigma}^*$ について変分する。組成比 c_A, c_B を行列要素にあらわに含む 15×15 (ZB) または 30×30 (WZ) の quasi Hamilton 行列が得られるので、その固有値を求める。

parameter: 結晶 AD と BD での III (II) 族原子、V (VI) 族原子の atomic energy と隣接原子間 transfer energy。

【計算結果】 下図は、GaAs を中央に、左側に III 族を置換した $Al_xGa_{1-x}As$ 混晶、右側に V 族を置換した $GaAs_{1-x}P_x$ 混晶、それぞれの電子エネルギー (X- Γ 間) の組成依存性の計算例である。 sp^3s^* の parameter の値には、GaAs および AlAs, GaP 結晶に対する band 理論計算や実測値にフィットするように見積もった値 [3] を用いた。伝導帯の底が GaAs の Γ 点 (直接) から X 点 (間接) へと移り変わる実験結果を定量的にも良く再現している。価電子帯もそれぞれ少しずつ形状が変化しているが、便宜上、価電子帯頂上がいつも energy の原点になるように描いているので注意。混晶時に現れる flat band については文献 [2] を参照。



[1] 篠塚, 応物学会 19p-PB26 (2014秋、北大) [2] Y. Shinozuka, APEX 7 (2014) 071201.

[3] P. Vogl, H. P. Hjalmarson and J. D. Dow, J. Phys. Chem. Solids 44 (1983) 365.