

Si_{1-x}Sn_x 価電子帯端オフセットの第一原理計算 First-principles calculation for valence band offset of Si_{1-x}Sn_x

¹名大院工, ²名大高等研究院, ³名大未来研, ⁴JST さきがけ

○長江祐樹¹, 黒澤昌志^{1,2,3,4}, 洗平昌晃^{1,2,3}, 中塚理¹, 白石賢二^{1,3}, 財満鎮明^{1,3}

¹Grad. Sch. Eng., Nagoya Univ., ²Inst. Adv. Res., Nagoya Univ., ³IMaSS, Nagoya Univ., ⁴PRESTO, JST

○Y. Nagae¹, M. Kurosawa^{1,2,3,4}, M. Araidai^{1,2,3}, O. Nakatsuka¹, K. Shiraishi^{1,3}, and S. Zaima^{1,3}

E-mail: ynagae@alice.xtal.nagoya-u.ac.jp

[はじめに] 波長 1.5 μm の光通信帯域に適合する光学材料として Si_{1-x}Sn_x 直接遷移型半導体の創生に注目が寄せられている。しかし、Si に対する Sn 原子の低い熱平衡固溶限 (約 0.1%) から、その作製、評価には困難が残されている。近年、我々は非熱平衡下で 30% に達する超高 Sn 組成多結晶 Si_{1-x}Sn_x の作製を実現し、またその光学特性なども報告してきた[1]。本研究では、発光素子構造等の設計に不可欠である Si_{1-x}Sn_x のエネルギーバンド構造の解明を目的に、第一原理計算による Si_{1-x}Sn_x 価電子帯端オフセット (VBO) の理論予測および Sn 組成に対する VBO の挙動の物理的要因の理解を目指した。

[計算手法とおよび計算モデル] 密度汎関数法 (density functional theory: DFT) 第一原理計算パッケージである Vienna ab initio simulation package (VASP) [2, 3]を用いて、Si_{1-x}Sn_x の 8 原子ダイヤモンド単位胞に対して電子状態計算を行った。交換相関項には改良型 Becke-Johnson 交換ポテンシャル、電子-イオン間相互作用には projector augmented wave ポテンシャルを用いた。各組成における物性値を、ユニークな原子配置ごとの物性値の形成確率重み付け平均をとる手法 (Hakoniwa method [4]) で計算した。

[計算結果] はじめに半導体接合界面における電子軌道混成に基づいて、各原子配置の Si_{1-x}Sn_x の電荷中性準位 (charge neutrality level: CNL) を計算した。占有・非占有軌道間の電子移動後の平衡 Fermi 準位 $\phi(\text{CNL})$ が CNL に等しいと置けば次式で表せる[5]。

$$\phi(\text{CNL}) = \text{VBM} + \frac{E_g D_{\text{VB}}}{D_{\text{VB}} + D_{\text{CB}}}$$

ここで、VBM は価電子帯端準位、 D_{VB} および D_{CB} は、それぞれ価電子帯端および伝導帯端の状態密度、 E_g はバンドギャップを表している。異なる組成の Si_{1-x}Sn_x 間において DFT 計算で得た VBM の差を単純に VBO として比較、評価できない。そのため、CNL を基準とした VBM を決定し、Si_{1-x}Sn_x 間の VBO を評価した (Fig. 1)。Si に対する Si_{1-x}Sn_x の VBO を Fig. 2 に示す。図中の●および◇は、それぞれ理論計算および多結晶 Si_{1-x}Sn_x に対する実験値 (硬 X 線光電子分光法で得られた価電子帯スペクトルから算出した値) [6]である。破線は、Si と α -Sn の報告値[7]をもとに VBO が Sn 組成で線形変化するものとして引いた近似曲線である。実験値はこの線形近似曲線に比べ上側へずれる傾向にあった。この実験結果を比較的再現する計算結果が得られたことがよく分かる。当日の講演までには、VBO の Sn 組成依存性がなぜ非線形性を示すのか、物理的起源を明らかにし、詳細な議論も合わせて報告したい。

[謝辞] 本研究の一部は、JSPS 科研費・基盤研究(S) (No. 26220605) および JST さきがけの研究助成により実施されました。

[参考文献] [1] M. Kurosawa *et al.*, Appl. Phys. Lett. **106**, 171908 (2015). [2] G. Kresse *et al.*, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996). [3] B. Adolph *et al.*, Phys. Rev. B **63**, 125108 (2001). [4] E. Kamiyama *et al.*, Mater. Sci. Semicond. Proc. **43**, 209 (2016). [5] M. Cardona *et al.*, Phys. Rev. B **35**, 6182 (1987). [6] M. Kurosawa *et al.*, "Silicon-tin semiconductors for near-infrared optoelectronic device applications," International Symposium on EcoTopia Science 2015, Nagoya, 28-3-9 (2015). [7] J. Menéndez *et al.*, Appl. Phys. Lett. **85**, 1175 (2004).

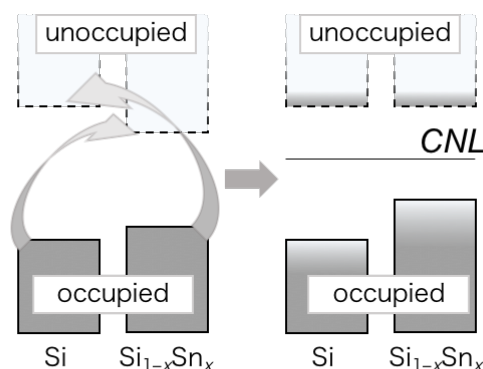


Fig. 1. Schematic view of the calculation of CNL by the correlation between occupied and unoccupied states in Si_{1-x}Sn_x.

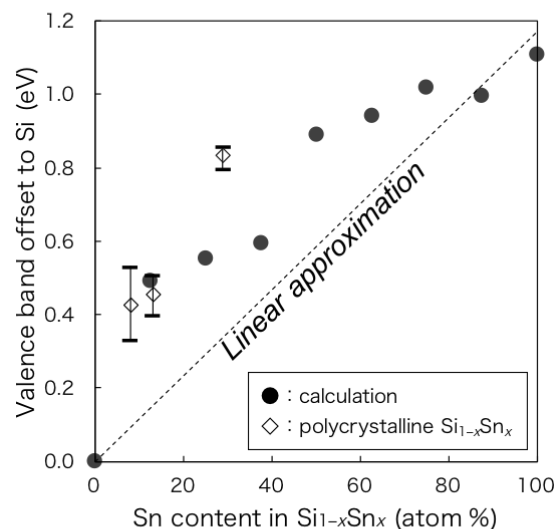


Fig. 2. The VBO of Si_{1-x}Sn_x relative to VBM of Si. The calculated results are plotted as circle and experimental results are plotted as diamonds (polycrystalline). Broken line corresponds to the result of the linear approximation for VBO between values of α -Sn and Si from Ref. 7.