

IQB 理論による II-VI 族化合物混晶半導体の電子状態の計算

Calculation of Electronic States in II-VI Semiconductor Alloys by IQB Theory: Zincblende Structure

和歌山大シス工 ○藤本徳明、小田将人、篠塚雄三

Wakayama Univ, ○Noriaki Fujimoto, Masato Oda, and Yuzo Shinozuka

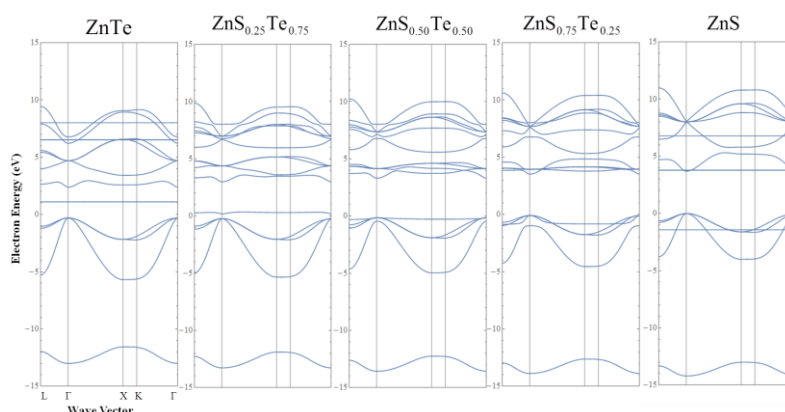
Email : s153044@center.wakayama-u.ac.jp

【はじめに】混晶半導体では、混晶成分原子がランダムに配置されるので、並進対称性がなくなり Bloch の定理が成立しない。そのため、電子状態の正確な計算は古くから難航している。最近、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) 理論が提案された。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とで、一般的な混晶の電子状態を見通良く計算することができる[1,2]。今回は、zincblende 構造を持つ II-VI 族半導体を対象に、IQB 理論を用いて 8 種の混晶半導体 $\text{II}_{1-x}\text{IV}'_x\text{-VI}$ (anion 置換) および $\text{II-VI}_{1-x}\text{IV}'_x$ (cation 置換) (II: Zn, Cd; VI: S, Se, Te)の電子状態を計算し、その組成比依存性を調べた。

【モデル】IQB 理論による変分計算手法の詳細については、[2]を参照されたい。価電子帯と伝導帯の変化と相関が同一枠内で導出可能となる $\text{sp}^3\text{s}^*\text{model}$ [3]と組み合わせることで、 15×15 の非 Hermite 行列が得られる。その固有値を求めることで擬波数 k に対する擬バンド構造を求めた。必要となる parameter は構成する結晶 II-VI 結晶での atomic energy と transfer energy で、文献[3,4,5]による値を使用した。

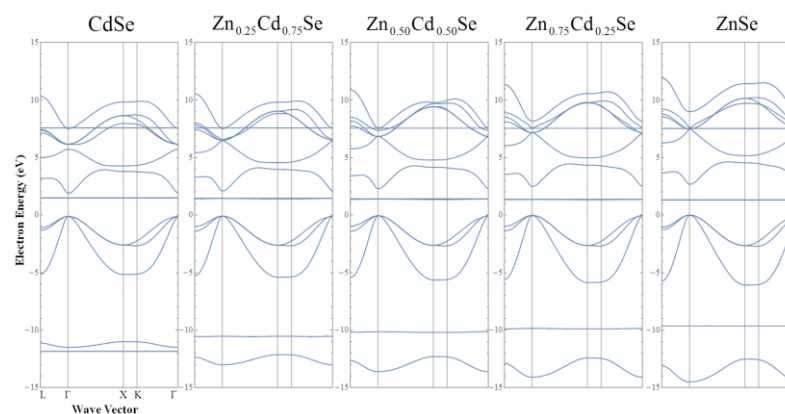
【計算結果】図は L- Γ -X-K- Γ 空間における、擬波数 k に対する 15 の energy band をあらわしたものである。一般に、今回のモデル計算において、混晶半導体中の電子状態は 5 個の疑似局在状態 QLS と 10 個の擬平均バンド QAB の mixing で決まる。QLS の相対位置がどこにあるかで、組成比依存性が 2 種類に大別できることが分かった。

図 1 では、ZnTe から ZnS へと組成が変化すると、gap 内に存在していた QLS が、価電子帯を超えて低エネルギー側へシフトし、QAB との mixing の結果として大きな band gap bowing を示す (b 値=3.750)。図 2 では、CdSe から ZnSe まで組成比を変化させても QLS はあまりシフトすることなく、結果として小さな band gap bowing を示す (b 値=0.387)。

図 1 $\text{ZnS}_x\text{Te}_{1-x}$ 電子状態の組成比依存性

【参考文献】

- [1] Y. Shinozuka, APEX 7 (2014) 071201
- [2] Y. Shinozuka and M. Oda, JJAP 54 (2015) 091202
- [3] P.Vogl, H. P. Hjalmarson and J. D. Dow, J. Phys. Chem Solids 44 (1983) 365
- [4] Daniel Olguin, Rafael Baquero, REVISTA MEXICANA DE FISICA 47 (1) 43-49, 2001
- [5] H.Hakan Gurel, Ozden Akinci, Hilmi Unlu, The Solid Films 516 (2008) 7098-7104

図 2 $\text{Zn}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ 電子状態の組成比依存性