

第一原理計算による GaAsN 混晶中の N 原子配置の バンド構造への影響の検討

First-principles study of the influence of N atomic configuration on the band structure of GaAsN

塚原悠太¹, 八木修平¹, 矢口裕之¹

Saitama Univ.¹

E-mail: y.tsukahara@opt.ees.saitama-u.ac.jp

[序論] GaAsN 混晶は低 N 濃度領域でバンドギャップエネルギーが著しく低下する巨大バンドギャップボウイングと呼ばれる特異な性質を示す。さらに In を加えた InGaAsN 混晶では GaAs や Ge などと格子整合させつつバンドギャップエネルギーを低くすることが可能であるため、多接合型太陽電池への応用が期待される [1]。ところが、GaAsN 混晶は他の半導体混晶に比べてバンドギャップエネルギーの揺らぎが大きいことが示されている [2]。また、同程度の N 濃度でも N 原子の配置によってバンドギャップエネルギーが異なることが指摘されている。本研究では、第一原理計算を用いて GaAsN 混晶における N の原子配置のバンド構造への影響について検討した。

[手法] 本研究では全電子密度汎関数プログラム WIEN2k [3]を用いた。図 1(a)に示すように閃亜鉛鉱構造の慣用単位胞を 3 次元方向にそれぞれ 2 倍に拡張した構造において、32 個の As 原子の内、2 個を N 原子に置き換えることで、様々な原子配置の GaAsN 混晶(N 組成:6.25%)を作成した。また、比較対象として N 原子の代わりに P 原子を配置した構造についても計算を行った。

[結果] 図 1(b)に慣用単位胞を単位とした座標(0,0,0)と(1,0,0)に N 原子を配置した場合のバンド構造を示す。また、表 1 に原子配置の異なる GaAsN 混晶と GaAsP 混晶のバンドギャップエネルギーを示す。GaAsN 混晶のバンドギャップエネルギーは N 原子の配置の違いによって 0.2771 eV~0.5506 eV の範囲で大きく変化するのに対して、GaAsP 混晶では、0.8491 eV~0.8450 eV と変化が小さい。このように、実験で報告されている GaAsN 混晶のバンドギャップエネルギーの大きな揺らぎには N 原子の配置が大きく影響することがわかる。発表ではバンド構造に加えて、電子密度分布などについても議論を行う。

[1] D. J. Friedman *et al.*, J. Cryst. Growth **195**,409 (1998).

[2] G. Bentoumi *et al.*, Phys. Rev. B **70**,035315 (2004).

[3] P. Blaha *et al.*, WIEN2k, 2001. ISBN 3-9501031-1-2.

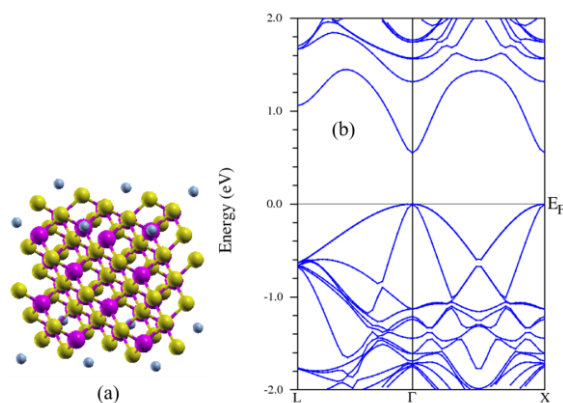


Fig. 1 (a)Crystal structure and (b)band structure of GaAsN with N atoms at (0,0,0) and (1,0,0)

Table 1 : Band gap energy for each atomic configuration in GaAsN and GaAsP

原子配置	E_g (GaAsN) [eV]	E_g (GaAsP) [eV]
(0,0,0), (1,1,0)	0.2771	0.8491
(0,0,0), (1,0,0)	0.5506	0.8450
(0,0,0), (1,1,1)	0.5175	0.8497
(0,0,0), (1/2,1/2,0)	0.4574	0.8491
(0,0,0), (1/2,1/2,1)	0.4529	0.8499