

(ZnO)_x(InN)_{1-x} 混晶半導体の電子状態の理論**Electronic structure of ZnInON calculated by interacting quasi-band theory**

和歌山大システム工 〇古木凌太 , 小田 将人 , 篠塚 雄三

Wakayama Univ. Ryota Furuki , Masato Oda, Yuzo Shinozuka

E-mail: s193062@center.wakayama-u.ac.jp

【研究背景・目的】九州大の板垣らが合成に成功した酸化亜鉛と窒化インジウムの新規混晶半導体 (ZnO)_x(InN)_{1-x}(以下 ZION と称する) は安定な Wurtzite 構造をもち、組成比によってバンドギャップを 3.3~1.7eV の間で制御可能であり、励起子発光デバイスなどへの応用が期待されている[1]。本研究は(II-VI)_x(III-V)_{1-x} 混晶半導体に IQB 理論を適用しその電子状態を解明することを目的とする。

【研究手法】混晶半導体の電子状態を扱う理論は Bloch の定理を適用できないことが原因で進展が停滞している。最近、我々は既存の手法とは異なる Interacting Quasi Band(IQB) 理論を提案し Zincblend 構造と Wurtzite 構造をもつ種々の化合物混晶半導体の電子状態の特性を明らかにした[2-4]。

今回、ZION に対して IQB 理論を適用し、電子状態の基底として sp³ model を採用、32×32 の非 Hermitic 行列を対角化して電子エネルギーバンドの組成比依存性を求めた。Tight Binding parameter は文献[5] を用い、特に band offset を考慮するため electron affinity によるパラメータ補正を行い、また Zn-N や In-O 結合の transfer energy は ZnO と InN の値の相乗平均で近似した。比較のため VCA(仮想結晶近似)によるバンド計算も行った。

【結果・考察】Fig.1 に組成比ごとのバンド図とバンドギャップの組成比依存性を示す。構成原子のサイトエネルギー差に由来する擬局在状態(QLS)と主バンド(VCA)が混ざることによってバンドに変化が見られる。ZION の場合、バンドギャップ中に QLS が現れ、組成比が 1:1 付近で主バンドと強く混成している。そのため Fig.1 (b)に示すように(ZnO)_{0.5}(InN)_{0.5} 付近でバンドギャップが組成比に対して非線形的な変化をすることが分かった。

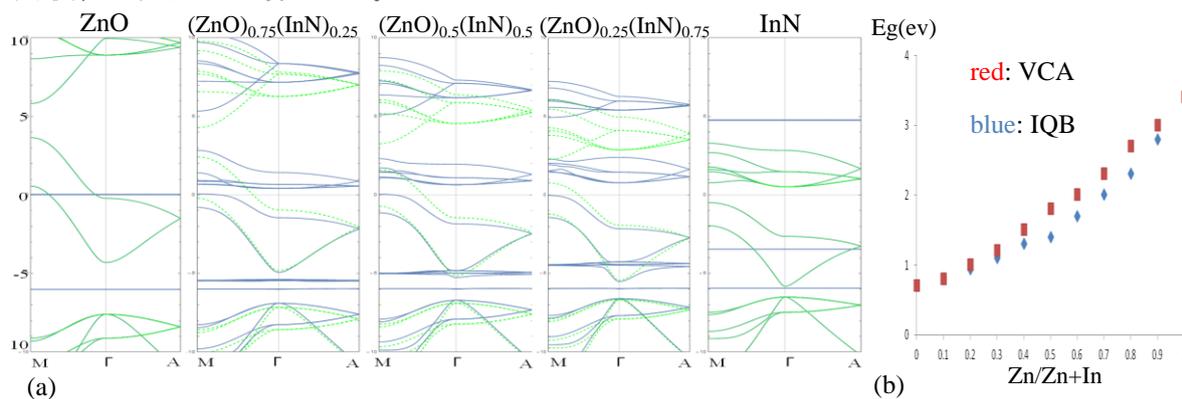


Fig.1 (a) Band structure of ZION. (green: VCA, blue: IQB) (b) Composition dependence of the band gap energy.

【参考文献】

- [1] N. Itagaki, K. Matsushima, D. Yamashita, H. Seo, K. Koga, M. Shiratani, Mater. Res. Express, **1**, 036405 (2014).
 [2] Y. Shinozuka, APEX, **7**, 071201 (2014). [3] Y. Shinozuka and M. Oda, JJAP, **54**, 091202 (2015). [4] A. Kishi, M. Oda, and Y. Shinozuka, Jpn. JJAP, **55**, 051202 (2016). [5] M. A. Caro, S. Schulz, and E. P. O'Reilly. Phys. Rev. B **88**, 214103 (2013)