

# 第一原理計算を用いた GaPN 混晶のバンドテイルによる 光吸収についての検討

## First-Principles Study of Optical Absorption Due to Band Tail States in GaPN Alloys

埼玉大理工 <sup>○</sup>矢口 裕之

Saitama Univ., <sup>○</sup>Hiroyuki Yaguchi

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

**[はじめに]** GaPN混晶ではバンドテイルを中間状態とした2段階光吸収によるアップコンバージョン発光[1]が生じることが報告されている。この2段階光吸収を太陽電池に応用することでエネルギー変換効率の向上が期待できる。本講演では、GaPN混晶における2段階光吸収で重要な役割を果たすバンドテイルによる光吸収について、第一原理計算を用いて検討した結果を報告する。

**[計算方法]** 計算には閃亜鉛鉱構造の基本単位胞を $4 \times 4 \times 4$ に拡張した結晶構造をスーパーセルとして用いた。スーパーセル中の64個のV族原子の内、2個をN原子、それ以外をP原子とすることで、窒素組成3.125%のGaPN混晶となるようにした。2個のN原子を様々な位置に配置し、第一原理計算によって歪緩和構造を求め、さらに電子構造、電子密度分布、光学定数を求めた[2]。

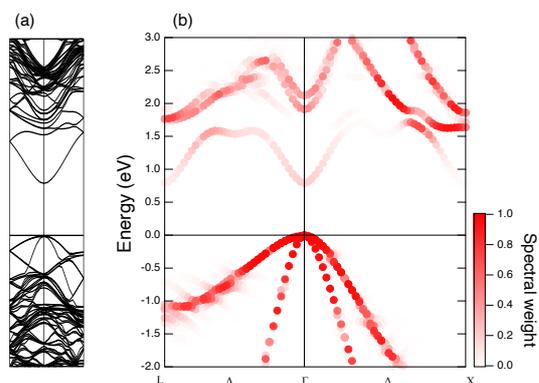


Fig. 1 (a) Folded and (b) unfolded band structure of GaPN.

**[結果]** Fig. 1に直交座標系 $(x, y, z) = (0, 0, 0)$ と $(2a, 2a, 0)$ に窒素原子を配置した結晶構造に対するバンド構造を示す。Fig. 1(a)に示すように、スーパーセルによるゾーンの折り返しが反映されて複雑になるので、スペクトル重みを考慮して展開した[3]バンド構造をFig. 1(b)に示す。最

低エネルギー伝導帯の底のスペクトル重みはあまり大きくないが、 $\Gamma$ 点に位置し、直接遷移型であることがわかる。N原子配置の異なる結晶構造のバンドギャップの多くが1.85 eV前後であるのに対して、Fig. 1で示したバンド構造では、バンドギャップは最も狭く0.794 eVである。したがって、GaPN混晶のバンドテイルの形成には、結晶中での様々なN原子配列の存在が深く関わっていると考えられる。

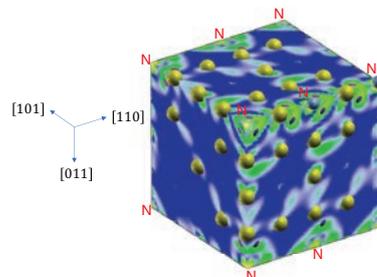


Fig. 2 Electron density of GaPN.

Fig. 1で示した最低エネルギー伝導帯に対応する電子密度分布をFig. 2に示す。 $[110]$ 方向に配置した2個のN原子およびそれらに隣接するGa原子での電子密度が高くなっていることがわかる。このような $(110)$ 方向の高い電子密度分布は狭いバンドギャップとなる結晶構造で共通して見られる特徴となっている。

本講演では、様々なN原子配置に対して求めた光学定数を統計処理することで得られるバンドテイルによる光吸収を実験結果と比較して議論する。

**[謝辞]** 本研究はJSPS科研費 JP19H02612の助成を受けた。

- [1] H. Yaguchi *et al.*, 13th ICNS (Bellevue, USA) July, 2019
- [2] P. Blaha *et al.*, WIEN2k, 2001. ISBN 3-9501031-1-2.
- [3] O. Rubel *et al.*, Phys. Rev. B **90**, 115202 (2014).