

# 第一原理計算によるII-VI族化合物半導体の 酸素ドーピングの電子構造の解析

## First-principles study of oxygen-dope states in II-VI semiconductors

横河電機 イノベーション本部<sup>1</sup>, 千葉大学 理学部<sup>2</sup>

○石川 真人<sup>1</sup>, 中山 隆史<sup>2</sup>

○M.Ishikawa<sup>1</sup>, T.Nakayama<sup>2</sup>

Yokogawa Electric Corp., Department of Physics, Chiba Univ<sup>2</sup>

E-mail: Masato.Ishikawa@jp.yokogawa.com

【背景・目的】 III-V 族半導体に窒素をドーピングするとバンド構造はリダクション(縮む)を起こすことが実験的・理論的に知られているが、近年の研究によって II-VI 族化合物半導体に軽原子の酸素をドーピングしても同様な現象が見られることが報告されている[1-4]。 II-VI 族半導体はイオン性が強く、ワイドギャップ材料として光デバイスへの応用が期待される材料系であり、特に酸素ドーピングした ZnTe、ZnSe では太陽電池材料に向けた研究も行われている。しかし、酸素ドーピングを行ったバンド構造がどのようにリダクションを起こしているかは不明な点が多い。そこで我々は酸素ドーピングによる II-VI 族半導体のバンド構造のリダクションのメカニズムについて数値計算を用いた解析を行った。

【方法】 数値計算は密度汎関数法に基づいた第1原理計算を使用した。用いた結晶のモデルはII族原子を 32 個,VI 族原子 31 個とし、VI 族サイトに1個の酸素原子をドーピングした計 64 個から構成されるジックブレンド構造を用いた。(濃度:3%)II 族原子には Zn を使用するがd電子系を考慮して価電子数を 10(=2+8)にして計算を行った。また、VI 族原子には S、Se、Te を用いてイオン性との相関が及ぼす影響を見ることにした。計算結果からバンド構造、電荷密度を求め、III-V 族半導体の窒素ドーピングの結果[5]と比較検討を行う。

【結果】 ZnTe の酸素ドーピングの結果は、バンドギャップ間に酸素が局在したリダクションの構造となり、III-V 族の GaP 等の間接遷移型と同じ傾向を示すことが分かった。これに対し ZnSe、ZnS では伝導帯と酸素原子の3s準位が重なった結果、伝導帯下端の準位が下がり、リダクションを引き起こす。これは III-V 族の InP、GaAs 等の直接遷移と同じ傾向である。リダクションの違いの解析として、価電子帯と伝導帯エネルギー準位でバンド構造の比較を行うと、価電子帯とのエネルギー順位に相違が観られ、計算結果を説明出来ることが分かった。発表では2原子をドーピングした場合の系のエネルギー計算から、原子間の相関と安定性の比較の報告も行う予定である。

本研究の一部は日本学術振興会科研費(奨励研究C、No24914007)により助成を受けたものである。

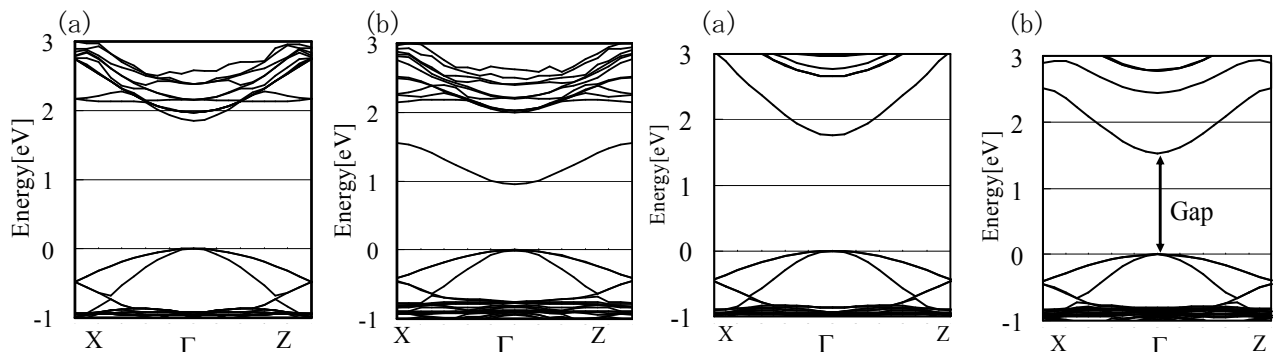


図1.ZnTe バンド構造(a)バルク、(b)酸素ドーピング

図2.ZnSe バンド構造(a)バルク、(b)酸素ドーピング

[1] P. R. C.Kent and A. Zunger :Phys.Rev.B 64, 115208 (2001).

[2] W. Waluciewicz et al, Phys.Rev Lett.91.Vol.24.246403(2003)

[3] H.Yaguchi, S.Miyoshi, G.Biwa, M.Kibune, K.Onabe, et.al, J.Crystal Growth 189/190(1998)49.

[4] T. Tanaka et al. Jpn. J. Appl. Phys. 50 (2011) 082304

[5] M.Ishikawa et al, Phys.St.Solidi C8, 352 (2011).