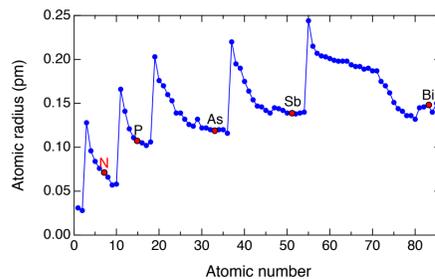


理論計算によるマテリアルズサイエンス

GaAsN混晶半導体

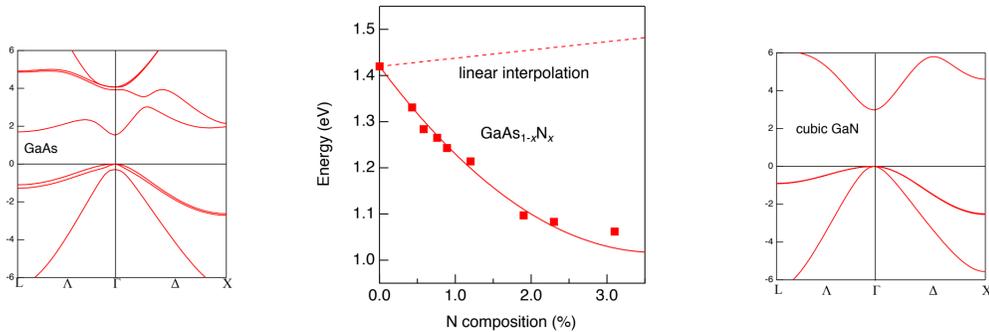
GaAsとGaNとを混合した半導体
それに関わらずGaAsとGaNの中間的な性質を示さない



Pauling Electronegativity				
12	13	14	15	16
	B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44
	Al 1.61	Si 1.90	P 2.19	S 2.58
Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55
Cd 1.69	In 1.78	Sn 1.96	Sb 2.05	Te 2.10
Hg 2.00	Tl 1.62	Pb 2.33	Bi 2.02	Po 2.00

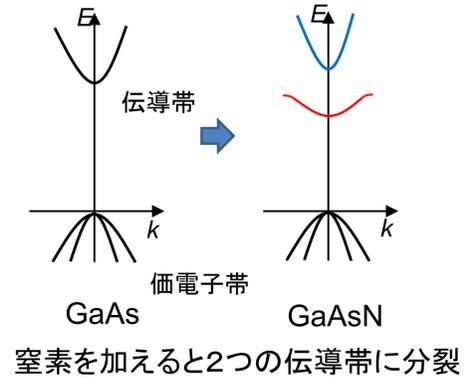
窒素と砒素では原子半径や電気陰性度が大きく異なることが原因

巨大バンドギャップボウイング



窒素の割合が増加するとバンドギャップが減少

伝導帯の分裂



窒素を加えると2つの伝導帯に分裂

これらの特徴から高効率太陽電池を実現する材料として期待されている

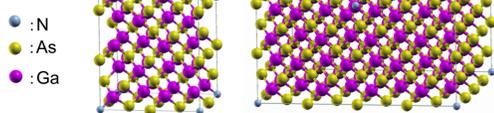
第一原理計算

経験的なパラメータを用いない理論計算

スーパーセル法を用いてGaAsN混晶半導体の電子エネルギー構造, 電子密度分布, 光吸収スペクトルを理論予測

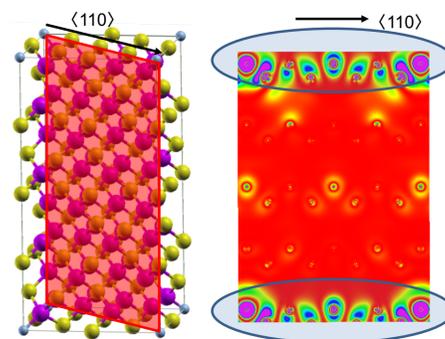
計算に用いたスーパーセル構造

この構造が無限に繰り返されたものを考える



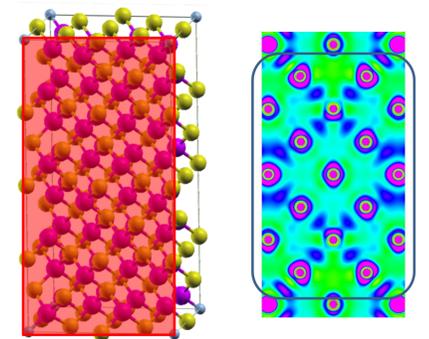
スーパーセル	$2a \times 2a \times 4a$	$4a \times 4a \times 4a$ fcc
平均窒素濃度	1.56%	1.56%
窒素配置	頂点	面心
分布	δ -ドーパ	一様

電子密度分布



低エネルギー側伝導帯

窒素原子および窒素原子間の特定方向に電子が多く分布



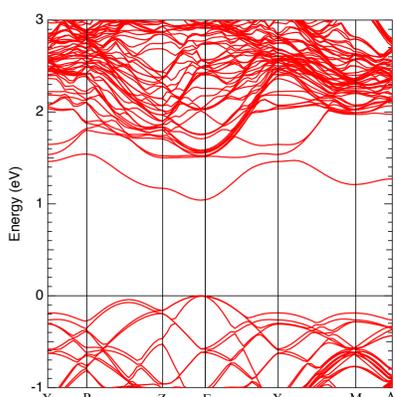
高エネルギー側伝導帯

窒素原子よりも砒素原子に電子が多く分布

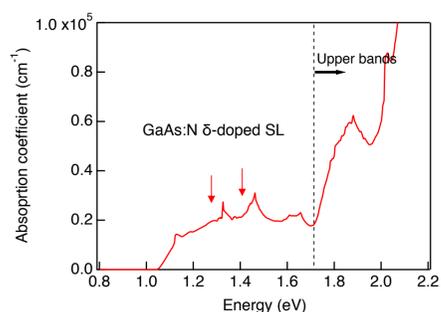
GaAs:N δ -ドーパ超格子 ($2a \times 2a \times 4a$)

電子エネルギー構造

光吸収スペクトル



- バンドギャップエネルギー減少
- 伝導帯の分裂

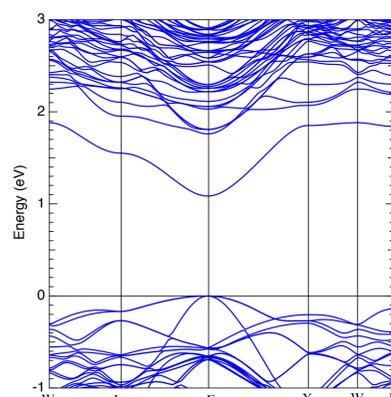


- 超格子に由来する鋭いピークが現れる
- 高エネルギー側のバンド端で光吸収が急激に増加

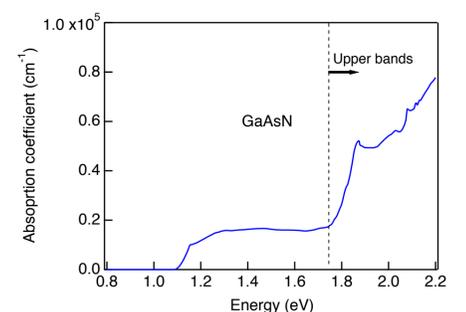
GaAsN ($4 \times 4 \times 4$ fcc)

電子エネルギー構造

光吸収スペクトル



- バンドギャップエネルギー減少
- 伝導帯の分裂



- 低エネルギー側はほぼフラット
- 高エネルギー側のバンド端で光吸収が急激に増加