

## 8. 積層欠陥のある半導体の電子状態

岸田 貴司

積層欠陥は、原子面の積み重ねの順番が狂う面欠陥であり、ダイヤモンド型、閃亜鉛型半導体において制御しきれない面欠陥として、しばしば試料中に現れる。CuClなどの半導体薄膜の励起子スペクトルを測定すると、薄膜の干渉縞の上に更に付加的な干渉縞がのっていて、あたかも薄膜中にさらに薄膜が入っているような構造のスペクトルが観測される例がいくつもある。これは、励起子の並進運動が面欠陥によって部分的にとじ込めをうけているとして解釈することが可能である。[1]

本研究は、光励起状態を調べる第1段階として閃亜鉛型半導体 GaP (111) 面の積層欠陥の電子状態を調べることを目的とする。バンド計算は、tight-binding 近似の枠内で行なった。この際、 $s$  と  $p$  からなる4つの軌道を用意し、異なる原子位置に局在する原子軌道間の重なりを考慮する非直交基底をもちい、また、エネルギー積分の計算は、2中心近似を行ない [2]、さらに、積層欠陥の効果をとりいれるために原子軌道間の相互作用は第3隣接までを考慮に入れた。

閃亜鉛型構造の物質を考えた時、このモデルにはエネルギー積分と重なり積分の独立なパラメーターが40個あるが、これらのパラメーターは、pseudopotential 法によって計算された [3] バルクバンド構造を再現するように最小二乗法で fitting を行ない、決定した。その結果、r.m.s. error が 0.09 eV の精度で価電子帯だけでなく伝導帯も含めて合計 19 eV のエネルギー範囲で合わせることができた。

このようにして定めたパラメーターの値を用いて、積層欠陥系の電子構造を計算した。簡単のため積層欠陥の存在による格子緩和は無視した。計算のためのモデルとして、面欠陥が周期的に繰り返す supercell の系とただ1つの面欠陥を含む(2つの)半無限系とを考察した。前者は単位胞の大きな3次元結晶のバンド計算として、後者は Green 関数による散乱理論の方法で取扱った。

結果として、積層欠陥近傍に局在する欠陥状態が見つかった。特に、 $\bar{\Gamma}$  点 (2次元ブリルアンゾーンの中心) では、価電子帯頂上よりはなれた2重縮退した局在状態があり、また伝導帯端からもはがれた局在状態があることがわかり、 $x$  (or  $y$ ) 偏光のもとで、局在状態間の dipole 遷移が起こることがわかった。

## 参考文献

- [1] 石原、張: 1988年日本物理学会分科会予稿集第2分冊 p.207.
- [2] J. C. Slater and G. F. Koster: Phys. Rev. 94, 1498 (1954).
- [3] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen: Phys. Rev. B14, 556 (1976).