

ウルツ鉱 $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ の分極の理論計算Theoretical Calculation of Polarization in Wurtzite $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$

関東学院大理工 °島田 和宏, 藤原 大亮, 高橋 弘樹, 加藤 ひとし, 平松 友康

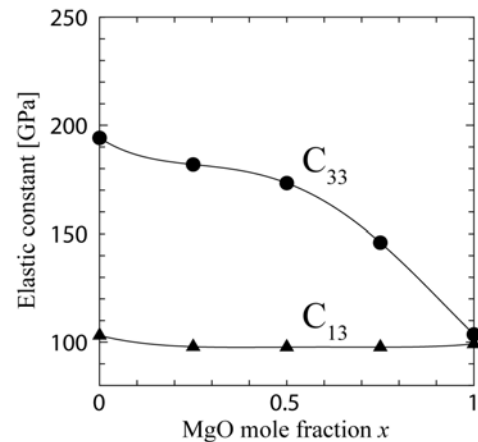
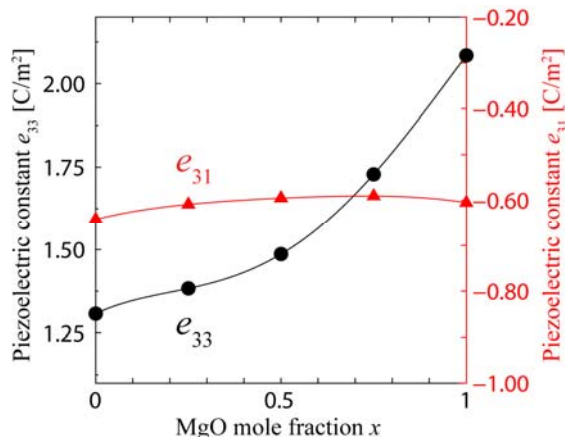
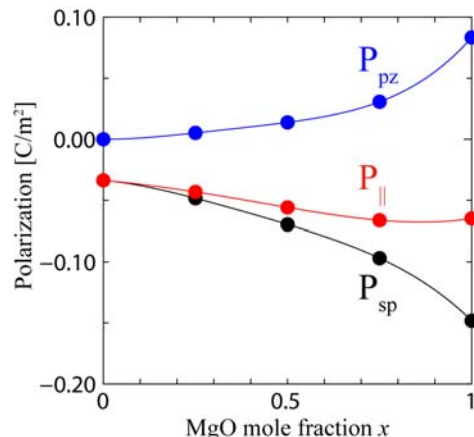
Kanto Gakuin Univ., °Kazuhiro Shimada, Daisuke Fujiwara, Hiroki Takahashi, Hitoshi Kato,

Tomoyasu Hiramatsu

E-mail: shimada@kanto-gakuin.ac.jp

ウルツ鉱 (wz) に成長した MgZnO はその対称性から自発分極や圧電分極を持ち、 ZnO 基板とのヘテロ界面で生じる分極電荷を利用した高電子移動度トランジスタの作製が可能である。一方、LED 等の発光素子の量子井戸内で生じる分極を原因とする電場は、電子と正孔の波動関数の重なりを減少させ、量子発光効率を低下させる原因となっており、分極に関する知見がこれらの素子の設計において重要な意味を持つ。本研究では、ウルツ鉱に成長した MgZnO の分極の大きさを明らかにするために密度汎関数理論に基づいた第一原理計算により、

$\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ の格子定数、弾性定数、圧電定数、自発分極 (P_{sp}) を求め、それらの計算結果を基に ZnO 基板上での成長を仮定したウルツ鉱 $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ の分極 ($P_{||}$) の計算を行った。第一原理計算で得られた格子定数より ZnO 基板上の $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ の歪みの値を求め、弾性定数 (Fig.1) および圧電定数 (Fig.2) の結果を基に圧電分極 (P_{pz}) を計算し、自発分極と合わせてウルツ鉱 $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ の c 軸方向の分極 $P_{||}$ を求めた (Fig. 3)。組成 x の増加とともに、圧電分極と自発分極は互いに正負逆方向に増加し、分極 $P_{||}$ の大きさも増加するが、 x の増加とともに圧電分極の大きさが自発分極より大きくなり、 $x > 0.86$ で分極 $P_{||}$ は減少に転じることがわかった。【謝辞】本研究の一部は、平成 24 年度採択私立大学戦略的研究基盤形成支援事業の研究として実施されたものである。

Fig. 1. Calculated elastic constants of wz- $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$.Fig. 2. Calculated piezoelectric constants of wz- $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$.Fig. 3. Calculated polarization in wz- $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ on a ZnO substrate.