

第一原理計算による AlN - BN 三元化合物の光学特性

Optical properties of AlN - BN Ternary Compound Calculated by Ab Initio

住友電工¹, 東京理科大理工², 大阪大基礎工³, 大阪大工⁴○山下 正史¹, 浜田 典昭², 船島 洋紀³, 吉矢 真人⁴Sumitomo Electric Industries, Ltd.¹, Science Univ. of Tokyo², Osaka Univ.^{3,4},○Masashi YAMASHITA¹, Noriaki HAMADA², Hiroki FUNASHIMA³ Masato YOSHIYA⁴

E-mail: ms-yam@sei.co.jp

III 族窒化物半導体として、AlN、GaN を軸に各種三元化合物が研究、実用化されているが、AlN - BN の系列での研究例はわずかである^{1),2),3)}。本研究では、第一原理計算により光学特性を導出し、RF - MBE での薄膜成長で得られた光学特性との比較、検討を行った。

ウルツ鉍構造の小規模なスーパーセルをモデルとして、全電子を計算するプログラムコード ABCAP (All-electron Band-structure CA l culation Package)にて電子状態密度分布、バンド構造を計算し、価電子帯・伝導帯間の吸収から光学特性を導出した。実測の光学特性は分光エリプソメトリーによる結果であり³⁾、AlN では屈折率 2.1、消光係数 0.01 (@波長 $\lambda = 400$ nm) と得られている。

AlN のバンドギャップとしては 6.2 eV の直接遷移であることが知られている。計算で求められたバンドギャップは 4.1 eV と小さいが、第一原理計算では系統的に過小評価される傾向と同様である。これを反映して図 1 に示すように、計算された光学特性の波長に対する振る舞いは、実測の AlN に較べると低エネルギー側 (短波長側) にシフトしているが、屈折率のレベルは一致している (図 1 - (i))。

本研究は大阪大学主催の CMD[®]ワークショップ⁴⁾で実施した計算に基づいて行った。

References

- 1) A. Y. Polyakov, M. Shin, W. Qian, M. Skowronski, D. W. Greve, and R. G. Wilson: J. Appl. Phys., 81 (4), pp. 1715 (1997).
- 2) A. Nakajima, K. Shinnosuke, Y. Furukawa, and H. Yonezu: Extended Abstracts (The 51 Annual Meeting, 2003): The Japan Society of Applied Physics, pp. 297 (2003) [in Japanese].
- 3) M. Yamashita, M. Yoshiya, Y. Ishikawa, H. Ohsato, and N. Shibata: Phys. Stat. Sol. (c) 4, No. 7, pp. 2486 - 2489 (2007).
- 4) CMD[®]ワークショップ URL : <http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/>

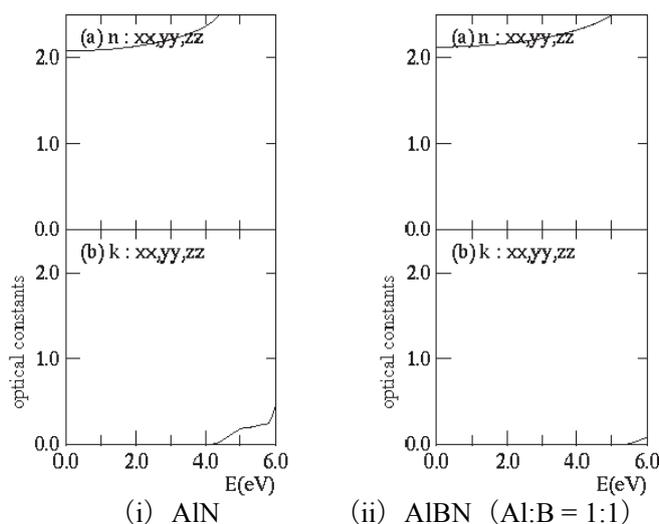


図 1. AlN - BN の光学特性の計算結果

(a) 屈折率 n / (b) 消光係数 k