

電場印加による六方晶窒化アルミニウム (h-AIN) のバンドギャップ変調

Band gap modulation of hexagonal AIN by an electric field

○太田 優一 (都産技研)

○Yuichi Ota (TIRI)

E-mail: ota.yuichi@iri-tokyo.jp

窒化アルミニウム(AIN)は広いバンドギャップを有する半導体であるため、パワーデバイスや光学素子への応用が期待されている。結晶構造はウルツ鉱構造が安定であり、ほとんどのヘテロエピタキシャル成長でこの構造になる。しかし、最近 Tsipas らによって Ag(111)面上にグラファイト状の六方晶 AIN(h-AIN)の成長が報告された[1]。h-AIN は窒化ホウ素(h-BN)と同じ構造を呈するために外部電場によってバンドギャップの変調が期待される[2]。そこで本研究では、2原子層 h-AIN のバンドギャップが電場によって変調可能か第一原理計算によって検証した。

計算には密度汎関数理論に基づく第一原理計算コードである Quantum Espresso パッケージを使用した[3]。図1に h-AIN の結晶構造を示す。本計算では c 軸方向に真空層を導入しており、格子定数を固定した状態で構造最適化を実施した。電場は c 軸方向に対して ESM 法によって印加した[4]。交換相関汎関数は LDA を指定し、ファンデルワールス力の補正は加えていない。

図2に電場を印加しない状態での2原子層 h-AIN のバンド構造を示す。なお、フェルミ準位(E_F)は 0 eV に合わせてバンド図を描画している。図2のバンドギャップは約 3.3 eV であり、間接遷移のバンド構造となっている。図3に $E = 1.8 \text{ V/\AA}$ 電界を印加した h-AIN のバンド構造を示す。図3のバンド構造ではバンドギャップが消失し、伝導帯の下端と価電子帯の上端がフェルミ準位を横切る結果となった。この h-AIN の系では電場の強度に応じて Γ 点にある伝導帯の下端が下がりはじめ、やがて金属的な状態へと変わることがわかった。この結果は h-AIN も h-BN のようにバンドギャップ変調が外部電場によって可能な事を意味するものである。

[1]P.Tsipas *et al.*, Appl. Phys. Lett. **103**, 251605 (2013). [2] M. Otani *et al.*, Phys. Rev. **B 83**, 073405 (2011). [3] P.Giannozzi *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter, **21**, 395502 (2009). [4] M. Otani *et al.*, Phys. Rev. **B 73**, 115407 (2006).

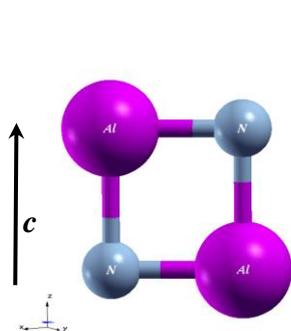


図1.h-AIN の結晶構造.

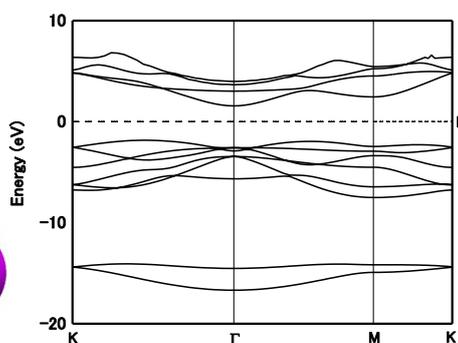


図2. 2原子層 h-AIN のバンド構造($E = 0 \text{ V/\AA}$).

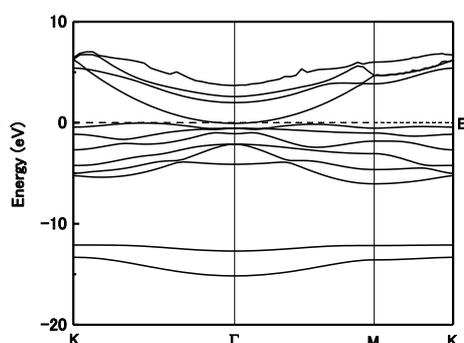


図3. 2原子層 h-AIN のバンド構造($E = 1.8 \text{ V/\AA}$).