

ウルツ鉱 $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ の格子定数、弾性定数、圧電定数、自発分極の 第一原理計算

First-principles calculations of lattice constants, elastic constants, piezoelectric constants,
and spontaneous polarization in wurtzite $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$

○島田 和宏¹、伊藤 大雅¹、岩崎 克宣¹、秩父 重英² (1. 関東学院大理工、2. 東北大多元研)

○Kazuhiro Shimada¹, Daichi Ito¹, Katsunori Iwasaki¹, Shigefusa F. Chichibu²

(1.Kanto Gakuin Univ., 2.IMRAM-Tohoku Univ.)

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

$\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ は、そのバンドギャップが深紫外域から赤外域までカバーし、GaN とともに格子整合可能であることから、光・電子デバイスの材料として様々な研究が行われている。InGaN 混晶同様、大きな圧電定数を持つ InAlN 系混晶においても、光・電子デバイスにおけるヘテロ接合面での光学特性や電子状態への歪みに対する影響を考慮することが必須であり、弾性定数や圧電定数、また自発分極の情報が欠かせない。

本研究では、ウルツ鉱 $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ 混晶について密度汎関数理論に基いた第一原理計算により弾性定数、圧電定数および自発分極を求めた。単位胞内の原子は、特殊準ランダム構造 (Special quasi-random structure: SQS) 法を用いたランダム配置と $(\text{InN})_m(\text{AlN})_n$ 超格子 (Super lattice: SL) の2つの方法で配置した。図1は弾性定数の計算結果である。SQS で原子を配置した計算結果は、 C_{33} 以外これまでの報告[1]とほぼ同様の結果となった。超格子についての結果もこれまでの報告[1]と同様の傾向が見られ、原子配置の違いによる弾性定数の組成依存性の変化が予測された。また、圧電定数や自発分極についても原子配置の違いによる組成依存性の違いが予測されたが、詳細については当日報告する。

[1] S. P. Łepkowski and I. Gorczyca, Phys. Rev. B83, 203201 (2011).

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。

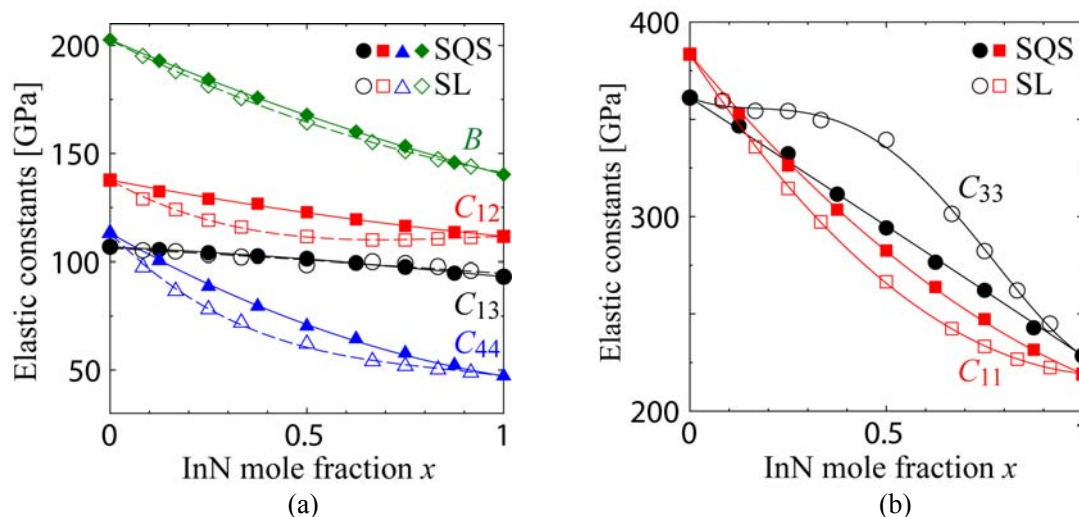


図1 ウルツ鉱 $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ の弾性定数(a) B 、 C_{12} 、 C_{13} 、 C_{44} 、(b) C_{11} 、 C_{33} の計算結果。