

強制振動子法による窒化物混晶の格子振動解析

Numerical Study on Phonon Properties of Nitride Compound Semiconductor Alloy
by Forced Vibrational Method福井大院工, [○]南部卓也, 大八木晋, Md.Sherajul Islam, 橋本明弘

Graduate School of Electrical & Electronics Engineering, University of Fukui,

[○]Takuya Nambu, Shin Oyagi, Md.Sherajul Islam, Akihiro Hashimoto

これまで我々は大規模かつ不規則性を有する 2 次元結晶系の格子振動解析について、強制振動子法¹⁾を用いて研究してきた。その結果、強制振動子法は大規模な不規則系の格子振動解析に有用であることを明らかにしてきた。また、3 次元の大規模な不規則系への適用範囲の拡張も比較的容易であると考えられる。窒化物 3 元混晶の格子振動解析は、従来、仮想結晶近似やスーパーセル法などにより研究されてきた。しかしながら、仮想結晶近似で用いられる仮想結晶モデルは現実の混晶系の結晶構造には、厳密には対応しておらず、また、スーパーセル法では大規模な不規則系については計算量が膨大になるため、現実には計算の実行が困難となる。すなわち、より正確な窒化物混晶の格子振動特性を得るためには、実際の混晶系の結晶構造に対応し、かつ、大規模な不規則系の格子振動を計算できるような、新たな解析方法が必要であると考えられる。そこで、今回我々は、3 元窒化物混晶系に強制振動子法を適用して格子振動の解析を試みたので報告する。

図 1 に強制振動子法を用いて計算した InN に関するフォノン状態密度(PDOS)を示す。図 1 より強制振動子法で計算された結果と第一原理計算による結果²⁾はよく一致していることが分かる。このことから強制振動子法は InN のフォノン状態密度の計算に有効であると考えられる。次に図 2 に InN と In_xAl_{1-x}N の $x=0.95$ のときの、強制振動子法で計算されたフォノン状態密度を示す。図 2 より低濃度の AlN 組成の混合により、AlN の固有振動モードが PDOS 中に、InN の固有なモードとは独立に出現しているのが分かる。また、InAlN 混晶系は自己主張型の混晶系である可能性が高いことを示唆している。

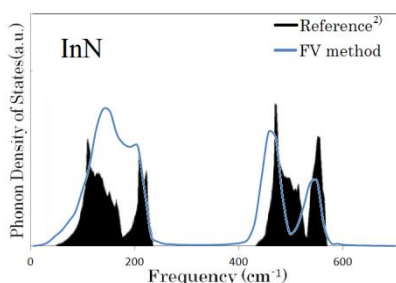
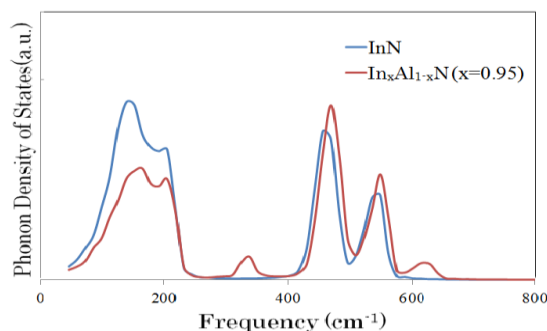


図 1. InN のフォノン状態密度

図 2. InN と In_xAl_{1-x}N ($x=0.95$) のフォノン状態密度1) M. L. Williams and H. J. Maris, Phys. Rev. B **31**, 4508 (1985).2) C. Bungaro, K. Rapcewicz, and J. Bernholc, Phys. Rev. B **61**, 6720 (2000).