

グラフェンライク III 族窒化物半導体のバンドアライメント

Band alignment of graphene-like III-nitride semiconductors

都産技研 ○太田 優一

TIRI ○Yuichi Ota

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

III 族窒化物半導体もグラフェンライク(g-like)構造をとりえる事が予測され、実際に成長した例が報告されている[1]。このような層状構造の物質は van der Waals 力を介したヘテロ構造が実現可能である。デバイス構造を検討する際に重要となるのが各半導体のバンドアライメントである。そこで本研究ではIII族窒化物半導体の g-like 構造およびウルツ鉱(WZ)構造のバンドアライメントを比較する事を目的とした。

真空を基準とする絶対エネルギーで各物質の CBM と VBM の位置を決定するために、Butler らの提案した経験的な式を採用した[2]。なお、g-like 構造のバンドギャップは第一原理計算によって求め、各原子の電気陰性度は Mulliken の定義による実験的に決定された値を用いた[3]。

図 1 に III 族窒化物半導体と典型的な半導体のバンドアライメントを示す。本手法では表面や界面の効果を考慮していないが、WZ の VBM の位置関係は他の手法と概ね一致している[4-5]。バンドオフセットに着目すると、g-like の方が WZ に比べ窒化物半導体同士で差が小さい傾向を示している。これは g-AlN と g-GaN がいずれも WZ 構造のバンドギャップよりも狭いことに起因している。したがって、g-like と WZ のバンドアライメントを比較すると g-like の方が同じ窒化物同士のバンドオフセットが小さい事が明らかとなった。[1] P.Tsipas *et al.*, Appl. Phys. Lett. 103, 251605 (2013). [2] M. A. Butler *et al.*, J. Electrochem. Soc.125, 228 (1978). [3] R. G. Pearson, Inorg. Chem.27, 34 (1988). [4] C. G. Van de Walle *et al.*, Nature 423, 626 (2003). [5] Y.-H. Li *et al.*, Appl. Phys. Lett. 94, 212109 (2009).

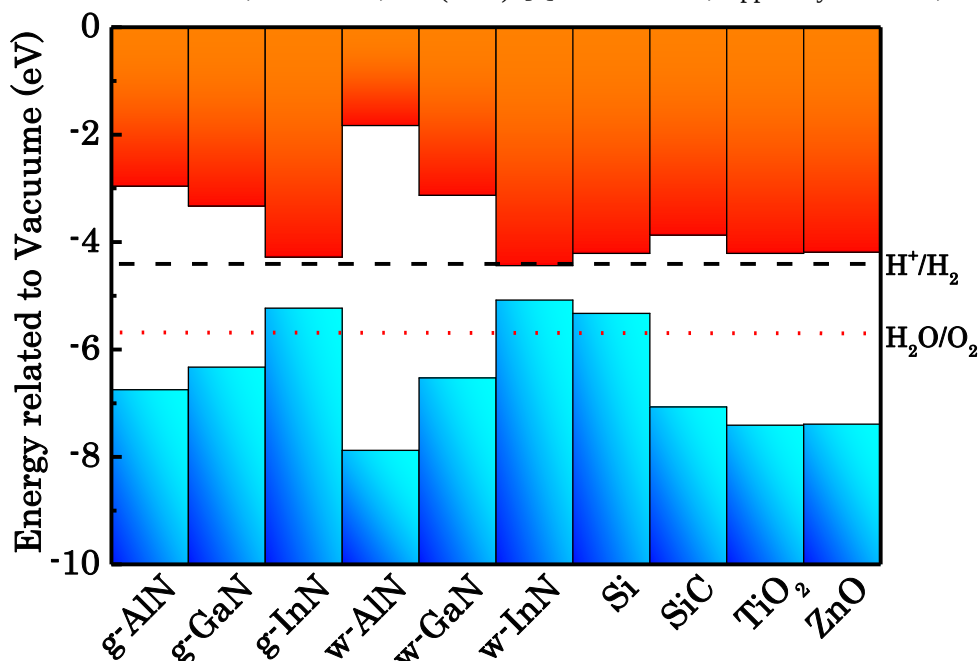


図 1.各種半導体のバンドアライメント.