

Sc_xAl_{1-x}N と Y_xAl_{1-x}N のバンドギャップとバンドオフセットの 第一原理計算

First-Principles Calculations of Band Gap and Band Off-Set of Sc_xAl_{1-x}N and Y_xAl_{1-x}N

関東学院大理工¹, 東北大多元研²

○島田 和宏¹, 市川 拓也¹, 坂巻 宏紀¹, 近 拳輔¹, 堂上 真人¹, 秩父 重英²

Kanto Gakuin Univ.¹, IMRAM-Tohoku Univ.², °Kazuhiro Shimada¹, Takuya Ichikawa¹, Hiroki

Sakamaki¹, Kensuke Chika¹, Masato Doujou¹, Shigefusa F. Chichibu²

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

【はじめに】六方晶の YN や ScN は、格子定数が GaN より大きいので、AlN との混晶で GaN と格子整合する結晶が得られ、かつ融点が高いことから GaN と一緒に高温成長できるという利点がある。また、組成を変化させることでバンドギャップを～2eV から 6eV まで変化させることができ、様々なデバイスへの応用も期待できる。本研究では、半導体ヘテロ接合設計の際に重要な情報となるバンドギャップとバンドオフセットの値を見積もるために密度汎関数理論に基づいた第一原理計算を行った。

【計算方法と結果】結晶構造は、岩塩構造 (rs) と六方晶ウルツ鉱 (wz) を仮定した。交換エネルギー汎関数は Wu-Cohen 型のものを用い、GGA-1/2 法[1]で、p 電子の自己相互作用補正を行ってバンド構造を計算した。バンドオフセットは、分岐点エネルギー[2]を基準にして算出した。図は岩塩構造と六方晶の Y_xAl_{1-x}N のバンドギャップのグラフである。岩塩構造のバンドギャップの組成依存性は、Vegard 則から大きくずれ、そのボーイングパラメータは組成に依存して、分数関数で表される形となった。一方、六方晶の方は、wz-AlN (P6₃mc) から、P6₃/mmc の六方晶 YN へと結晶構造が変化するため、バンドギャップの変化は複雑なものとなった。Sc_xAl_{1-x}N についても同様の結果が得られた。バンドオフセット等については当日報告する。また、GaN と格子整合する Sc_xAl_yGa_{1-x-y}N および Y_xAl_yGa_{1-x-y}N についても報告の予定である。

【参考文献】[1] Ferreira *et al.*, Phys. Rev. B 78, 125116 (2008). [2] Schleife *et al.*, Appl. Phys. Lett. 84, 012104 (2009). [3] Zukauskaitė *et al.*, J. Phys. D: Appl. Phys. 45, 422001 (2012).

【謝辞】本研究で行われた計算は、東京大学情報基盤センターのスーパーコンピューティングシステムを利用して行った。

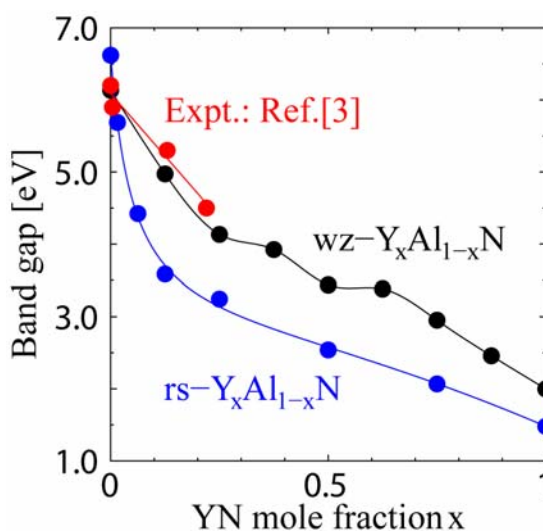


Fig. 1. Calculated band gap of rs- and wz-Y_xAl_{1-x}N.