

III 族窒化物二次元原子層膜の構造変形に関する理論的研究

Theoretical study for crystal deformation of two-dimensional atomic layer in group-III nitrides

三重大院工, °坪井 佑磨, 秋山 亨, 中村 浩次, 伊藤 智徳

Mie Univ., °Yuma Tsuboi, Toru Akiyama, Kohji Nakamura, Tomonori Ito

E-mail: 416M609@m.mie-u.ac.jp

【はじめに】近年、グラファイト等のハニカム構造を持つヘキサゴナル(Hex)構造を持つ二次元原子層膜が特異な物性を持つ新材料として注目されている。特に、BN(Hex 構造が安定)をはじめとする III 族窒化物においては、分子線エピタキシャル成長法によって Ag(111)基板上に Hex 構造を持つ AlN 原子層膜(Hex-AlN)の作製がなされており[1]、他の III 族窒化物に対しても第一原理計算によりその形成可能性が示唆されている[2]。しかしながら BN を除く III 族窒化物の安定構造は WZ 構造であり、準安定構造である Hex 構造から安定構造である WZ 構造への構造変形が容易に起こり得ることが考えられる。これまでに我々は、C, BN, および BeO における Hex 構造を含む構造変形過程およびそのエネルギー障壁を計算し、これらの材料のイオン性と構造安定性ならびに構造変形に伴うエネルギー変化との関係性を明らかにしてきた[3]。本研究では、Van-der Waals 相互作用を考慮した第一原理計算[4]を用いて準安定構造である III 族窒化物二次元原子層膜における構造変形過程およびそのエネルギー変化を解析し、これら III 族窒化物のイオン性と構造変形に伴うエネルギー変化との関係性を明らかにする。

【結果および考察】 Fig.1(a)および 1(b)はそれぞれ第一原理計算によって得られた BN および AlN での各格子パラメータ(c/a および b/a)における凝集エネルギーの等高線図である。どちらの材料においても、Hex 構造から WZ 構造への構造変形の際には主に c/a が変化していることが解る。また、Hex-AlN における $c/a(=1.28)$ は Hex-BN における $c/a(=2.64)$ と比べて小さく、Hex-AlN の場合は層内だけでなく層間でも Al-N ボンドが形成し、Hex-AlN を構成する原子は 5 配位となることを示唆している。さらに、これらのエネルギー等高線図から得られる各準安定構造間のエネルギー変化[Fig. 2(a)および 2(b)]から、Hex 構造から WZ 構造への構造変形に対するエネルギー障壁が BN および AlN においてそれぞれ 0.19 および 0.02 eV であることから Hex-AlN は安定構造である WZ 構造への構造変形が容易に起こり得ることを示している。これはエネルギー障壁がボンド電荷間の斥力相互作用に起因しており、Hex-AlN における層内のボンド電荷が少ないためである。講演では GaN および InN に対する解析結果についても議論する。

【参考文献】 [1] P. Tsipas *et al.*, Appl. Phys. Lett. **103**, 251605 (2013). [2] H. L. Zhuang *et al.*, Phys. Rev. B **87**, 165415 (2013). [3] Y. Takemoto *et al.*, e-J. Surf. Sci. Nanotech. **12**, 79 (2014). [4] S. Grimme *et al.*, J. Chem. Phys **132**, 154104 (2010).

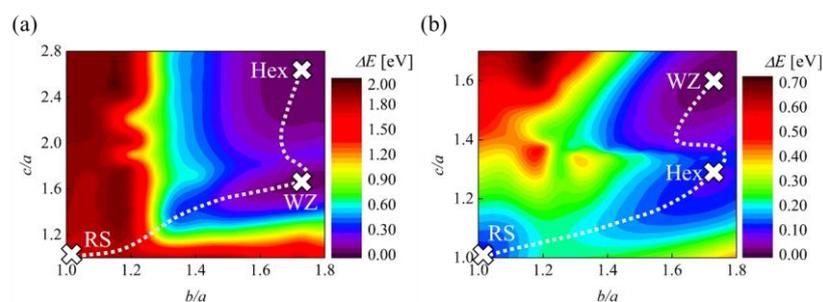


Fig.1: Contour plots of cohesive energy as functions of structural parameters b/a and c/a for (a) BN and (b) AlN. Hex, WZ, and RS denote hexagonal, wurtzite, and rocksalt structures. The origin of cohesive energy corresponds to Hex (WZ) structure in BN (AlN). Dashed lines denote the crystal structure deformation path.

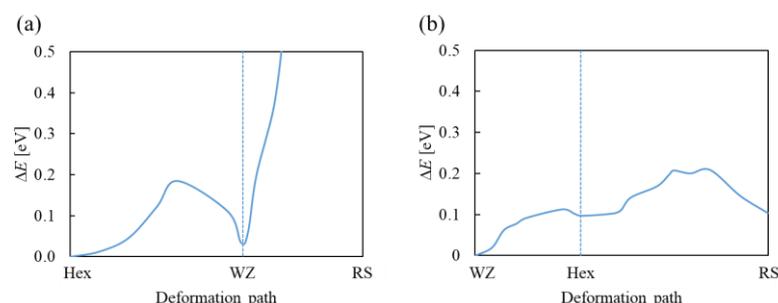


Fig. 2: Energy difference along the crystal deformation path shown in Fig. 1 for (a) BN and (b) AlN.