

III 族窒化物半導体超格子におけるバンドギャップの組成依存性

Compositional Dependence of Band Gaps in III-Nitride Semiconductor Superlattices

○河村 貴宏¹、藤田 裕真¹、浜地 祐矢¹、秋山 亨¹、寒川 義裕²

(1. 三重大院工、2. 九大応力研)

○Takahiro Kawamura¹, Yuma Fujita¹, Yuya Hamaji¹, Toru Akiyama¹, Yoshihiro Kangawa²

(1. Mie Univ., 2. RIAM, Kyushu Univ.)

E-mail: tkawamura@mach.mie-u.ac.jp

はじめに GaN、AlN、InN はそれぞれ約 3.5、6.2、0.7 eV のバンドギャップを持ち [1]、これらの材料で構成される超格子や混晶はその組成によってバンドギャップが変化するため [2]、原理的には窒化物半導体のみで赤外から深紫外まで幅広い波長領域に対応した光学デバイスを実現することが可能である。本研究では窒化物半導体超格子におけるバンドギャップと超格子の組成や層厚との関係を明らかにすることを目的として、第一原理計算を用いてバンド構造の解析を行った。

計算方法 解析には第一原理計算プログラム Quantum ESPRESSO[3]を用いた。理想的な結晶構造を元に作成した超格子の計算モデルに対して構造緩和計算を行った後、pseudopotential self-interaction correction (pSIC) 法 [4,5] による補正を用いてバンド構造解析を行った。図 1 に超格子構造の計算モデルの 1 例を示す。3ML の AlN と 1 ML の InN で構成されており、この構造を 3AlN/1InN 超格子と表記する。超格子構造の解析を進める前に最小ユニットセル (原子数 4 個) を用いて GaN、AlN、InN のバンドギャップを計算した結果、それぞれ約 3.4、5.8、0.9 eV であり、実験値に近い値が得られることを確認した。

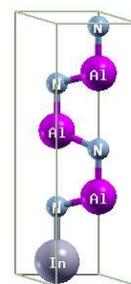


図 1: 3AlN/1InN 超格子の計算モデル

結果および考察 AlN/InN および InN/GaN 超格子のバンドギャップを In 組成に対する変化として表したグラフを図 2 に示す。グラフ中の破線は AlN と InN、または InN と GaN の値を結んだ線分に bowing parameter (AlGa_{1-x}In_xN および In_xGa_{1-x}N 混晶のバンドギャップの予測値である。In 組成が少ない範囲では混晶に比べて超格子の値が小さく、In 組成が多い範囲では混晶に近い値になる傾向が見られた。単純な超格子構造では層厚を変えてもこれ以上の値を得ることは難しいが、混晶層からなる超格子構造 (例えば InGa_{1-x}GaN/GaN 超格子) は混晶と同程度またはそれ以上の値を持つことが報告されている [7]。AlN/InN 超格子については AlN と InN のバンドギャップの差が大きく制御可能な幅が広いので、その理解には様々な組成・層厚の組み合わせについての検討が必要である。

謝辞：本研究は JSPS 科研費 16H06418 の助成を受けて行われました。

[1] J. Wu, J. Appl. Phys. **106**, 011101 (2009). [2] I. Gorczyca et al., Superlattice Microstruct. **82**, 438 (2015). [3] P. Giannozzi et al., J. Phys: Condens. Matter **21**, 395502 (2009). [4] A. Filippetti et al., Phys. Rev. B **67**, 125109 (2003). [5] M. Wierzbowska et al., Phys. Rev. B **84**, 245129 (2011). [6] I. Gorczyca et al., Phys. Rev. B **80**, 075202 (2009). [7] T. Suski et al., Appl. Phys. Lett. **104**, 182103 (2014).

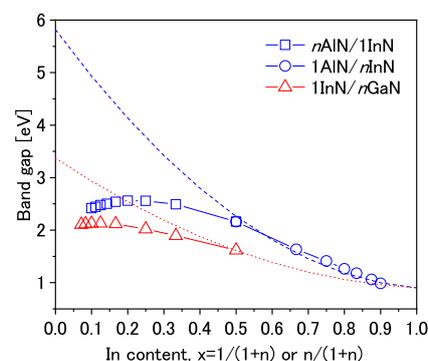


図 2: AlN/InN および InN/GaN 超格子のバンドギャップの In 組成依存性