

BAlN および BGaN 混晶における結晶構造および電子状態の基板拘束の影響 Effects of lattice constraint on structures and electronic properties of BAlN and BGaN alloys

三重大院工, ○秋山亨, 中村浩次, 伊藤智徳

Mie University, ○Toru Akiyama, Kohji Nakamura, Tomonori Ito

E-mail: akiyama@phen.mie-u.ac.jp

【はじめに】ホウ素を含むIII族窒化物は、深紫外領域(UV)の光デバイスとしての適用が期待される材料として注目されている。[1]しかしながら、ウルツ鉱(WZ)構造となるAlNやGaN等のIII族窒化物とは異なりBNはハニカム状のヘキサゴナル(Hex)構造をとり、さらに近年の光学測定により6 eV程度の間接バンドギャップを持つことが報告されている[2]ことから、その組成制御および物性制御は重要な課題となっている。これまでに、密度汎関数計算によりWZ構造を仮定した場合での $B_xGa_{1-x}N$ 混晶のバンドギャップの組成依存性が理論的に検討されており、B組成が15~25%において直接遷移から間接遷移へと変化することが予測されている。[3,4]しかしながら、これらの混晶における結晶構造の安定性および成長基板による基板拘束の影響については明らかにされないの現状である。本研究では、 $B_xAl_{1-x}N$ および $B_xGa_{1-x}N$ 混晶を対象として、全組成領域における結晶構造の安定性および電子状態を密度汎関数計算により明らかにし、さらに基板拘束の影響も解明して、 $B_xAl_{1-x}N$ および $B_xGa_{1-x}N$ 混晶における物性制御の可能性を検討する。

【結果および考察】Fig.は WZ 構造および Hex 構造における $B_xAl_{1-x}N$ および $B_xGa_{1-x}N$ 混晶のエネルギー差 ΔE をB組成 x の関数として示したものであり、 ΔE が正(負)の場合において Hex(WZ)構造が安定であることを表している。[5]バルク状態においては $x=1.0$ (BN)を除く全ての領域で WZ 構造が安定となるのに対して、基板拘束により WZ-Hex 構造間の相対的安定性が変化することがわかる。特に AlN および GaN 基板を想定した場合では、 $0.125 \leq x \leq 0.25$ でエネルギー差がなくなり、Hex 構造および WZ 構造が共に取り得るようになる。これは、Hex 構造での AlN および GaN の格子定数 a (それぞれ 3.28 および 3.34 Å)と WZ 構造の格子定数 a (それぞれ 3.10 および 3.19Å)との違いに起因しており、B 原子を含むことで Hex 構造の混晶と WZ 構造の基板との格子不整合が減少するからである。講演では、これら基板拘束の影響を考慮した場合での電子状態についても議論する。

【参考文献】 [1] T. Honda *et al.*: J. Lumin. **87-89**, 1274 (2000). [2] G. Cassaboais, P. Valvin, and B. Gil: Nat. Photonics **10**, 262 (2016). [3] M. Zhang and X. Li: Phys. Status Solidi B **254**, 1600749 (2017). [4] J. -X. Shen *et al.*: Phys. Rev. Mater. **1**, 065001 (2017). [5] T. Akiyama *et al.*: Appl. Phys. Exp. **17**, 23094 (2018).

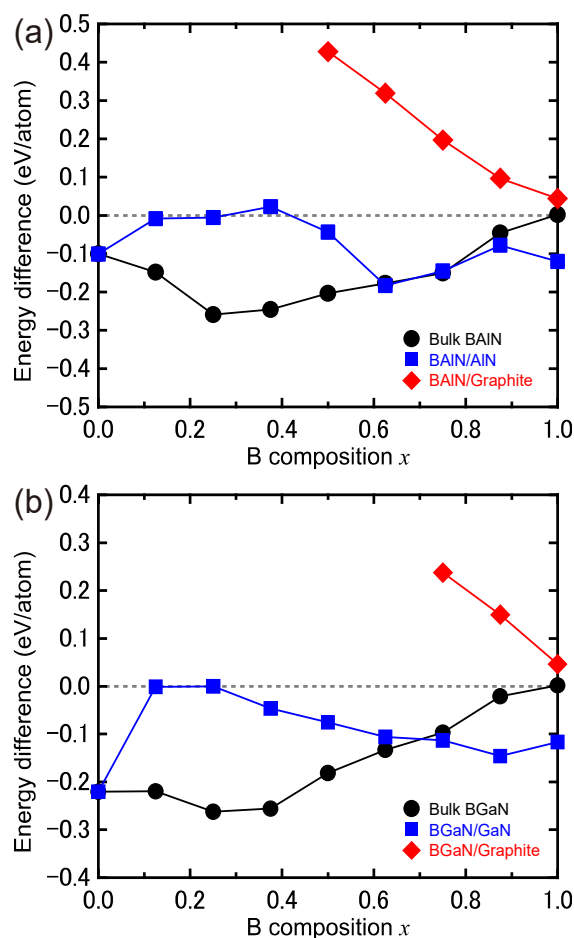


Fig. Calculated energy difference between Hex and WZ structures for (a) $B_xAl_{1-x}N$ and (b) $B_xGa_{1-x}N$ alloys as a function of boron composition x . Positive values of the energy difference indicate that the Hex structure is more stable than the WZ structure. The lattice constant of graphite ($a=2.47$ Å) and that of the AlN (GaN) substrate for $B_xAl_{1-x}N$ ($B_xGa_{1-x}N$) are considered. Note that hexagonal $B_xAl_{1-x}N$ ($B_xGa_{1-x}N$) alloys with lattice constraint by graphite for $x < 0.5$ (0.75) are not found even as a metastable structure.