

InN/AlN 超格子構造のバンドギャップと格子歪みとの関係

Relationship between band gaps and lattice strain of InN/AlN superlattices

○(M2)濱地 祐矢¹, 河村 貴宏¹, 秋山 亨¹, 寒川 義裕²

(1. 三重大院工、2. 九大応力研)

○(M2)Yuya Hamaji¹, Takahiro Kawamura¹, Toru Akiyama¹, Yoshihiro Kangawa²

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

E-mail: 418m139@m.mie-u.ac.jp

はじめに AlN, GaN, InN により構成される混晶や超格子は、その組成や層厚によりバンドギャップの値が大きく変化するため[1], 様々な光・電子デバイスへの応用が期待されている. 各種基板 (Si, サファイア, SiC, GaN, AlN など) 上への作製が考えられるが, 基板との格子定数差により超格子構造が圧縮・引張歪みを受けるため, バンド構造も変化すると思われる. 本研究では, 第一原理計算を用いて InN/AlN 超格子のバンドギャップと格子歪みとの関係を調べた.

計算方法 本研究の計算には, 第一原理計算プログラム QANTUM ESPRESSO を使用した[2]. 超格子モデルに対して a, m 軸方向の格子定数は AlN, GaN または InN の値に固定し, c 軸方向のみ格子緩和計算を行うことで各種基板上の超格子構造を模擬した. その後, pseudopotential self-interaction correction (pSIC)法[3, 4]を用いてバンド構造を計算した.

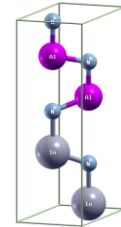


Fig. 1 Structure of 2InN/2AlN

結果及び考察 Fig. 1 に 2InN/2AlN 超格子構造を示す. また Fig. 2 に各種基板上への作製を仮定した際のバンドギャップの計算結果を示す. この結果から, 同一組成・同一構造 (層厚) の超格子でも異なる基板上に作製した場合はバンドギャップが異なることが分かった. 全体的に基板の a, m 軸方向の格子定数が大きいほど (AlN < GaN < InN) バンドギャップが大きくなっており, InN/GaN 超格子に関する先行研究[1]と同様の傾向が見られた.

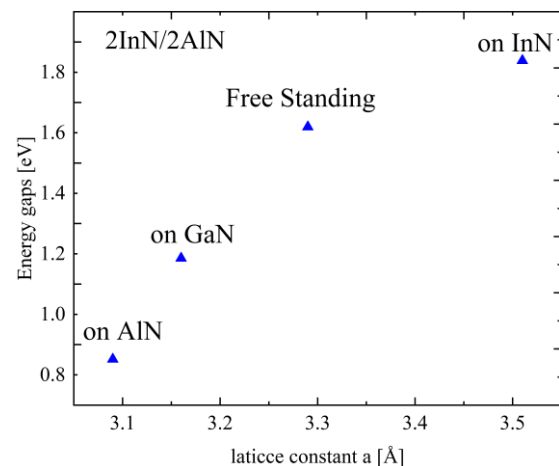


Fig. 2 Band gaps of 2InN/2AlN SLs on each substrate

謝辞: 本研究は JSPS 科研費 JP16H06418 の助成を受けて行われました.

参考文献

[1] I. Gorczyca et al., Superlattice Microstruct. **82**, 438 (2015). [2] P. Giannozzi et al., J. Phys. Condens. Matter **21**, 395502 (2009). [3] A. Filippetti et al., Phys. Rev. B **67**, 125109 (2003). [4] M. Wierzbowska et al., Phys. Rev. B **84**, 245129 (2011).