

## 第一原理計算による GaN 表面の電子状態と電界効果

### First-principles calculations of surface electronic states and field effects in GaN

新潟大理<sup>1</sup>, 新潟大自然<sup>2</sup>, 新潟大工<sup>3</sup>, AMED 先端計測<sup>4</sup>

○(B) 齋藤雅樹<sup>1</sup>, (M1) 関川卓也<sup>2</sup>, 佐々木進<sup>3,4</sup>, 大野義章<sup>1</sup>

Faculty of Science, Niigata Univ.<sup>1</sup>, Graduate School of Science and Technology, Niigata Univ.<sup>2</sup>,

Faculty of Engineering, Niigata Univ.<sup>3</sup>, AMED SENTAN.<sup>4</sup>,

◦M. Saitō<sup>1</sup>, T. Sekikawa<sup>2</sup>, S. Sasaki<sup>3,4</sup>, Y. Ōno<sup>1</sup>

E-mail:s15b247j@mail.cc.niigata-u.ac.jp

青色発光ダイオードの材料となる半導体として注目されている GaN は、自発分極を仮定することによりその発光現象のメカニズムが説明されてきたが、自発分極の直接的な観測の報告はなされていなかった。ごく最近、佐々木らにより、核スピンをプローブとして自発分極を実験的に直接観測したとの報告がなされた[1]が、我々の知る限り、理論的な報告は未だなされていない。

GaN の第一原理計算に関しては、これまで構造や弾性定数[2]、表面に H や Gd、Ga、N、Si を付加させた際の計算[3-6]、格子振動の計算[7]、有効質量の計算[8]などが主に行われている。今回我々は第一原理計算ソフトウェア OpenMX を用いて GaN のバルクに対するエネルギーバンド、GaN 表面の部分状態密度、エネルギーバンドを計算し、実験との比較検討を行った。当日は、計算の結果に加え、計算方法の詳細や近似の妥当性についても議論する。また、GaN の発光現象に対する自発分極の寄与、自発分極の確証を得るための手法などについても議論する。

[1] 2018 年応用物理学会秋季講演会[20a-146-2]GaN 自立基板における自発分極の直接観測

[2] A. Zoroddu, F. Bernardini, P. Ruggerone, V. Fiorentini: Phys. Rev. B 64, 045208 (2001)

[3] C.G.Van de Walle, J. Neugebauer: Phys. Rev. Lett.88, 066103 (2002)

[4] Y. Gohda, A. Oshiyama: Phys. Rev. B 73, 235214(2006)

[5] A. L. Rosa, J. Neugebauer: Phys. Rev. B 73, 205346(2006)

[6] A. L. Rosa, J. Neugebauer: Phys. Rev. B 73, 205314(2006)

[7] C. K. Gan, Y. P. Feng, D. J. Srolovitz: Phys. Rev. B 78, 161201(R)(2008)

[8] M. Suzuki, T. Uenoyama, A. Yanase: Phys. Rev. B 52,8132(1995)