

GaN 自発分極の第一原理計算による検討

First-principles calculations of spontaneous polarization in GaN

新潟大自然^A, 名古屋大未来^B, 新潟大工^C, AMED 先端計測^D, 新潟大理^E

○(M1) 関川卓也^A, 白石賢二^B, 佐々木進^{C,D}, 大野義章^E

Graduate School of Science & Technology Niigata Univ.^A,

IMaSS Nagoya Univ.^B,

Faculty of Engineering Niigata Univ.^C, AMED SENTAN^D,

Faculty of Science, Niigata Univ.^E

OT. Sekikawa^A, K. Shiraishi^B, S. Sasaki^{C,D}, Y. Ōno^E

GaN/AlGaIn 界面を用いる HEMT は、ドーパントを用いずに 2 次元電子ガスが形成されること等から、GaN では自発分極が生じていることが示唆されてきた。近年、佐々木らが核スピンをプローブとして、自発分極を実験的に直接観察したとの報告がなされた[1]が、我々の知る限り、自発分極についての理論的な報告はなされていない。

これまで GaN の第一原理計算に関しては、構造や弾性定数[2], 表面に水素を付加させた場合の計算[3], 格子振動の計算[4], Gd ドープの計算[5], 有効質量の計算[6]などが行われてきた。今回我々は、佐々木らの報告とその詳細 [1]を踏まえて、自立 GaN 基板における自発分極の存在を次の異なる手法により、明らかにした。具体的には、①第一原理計算ソフトウェア OpenMX を用いた Mulliken 電荷解析, Voronoi 電荷解析, ②ポテンシャル分布を精度よく計算できる第一原理計算ソフトウェア WIEN2k を用いた電場勾配の解析を行った。

当日は、両者の結果に基づき、発生する電界の方向とその物性への影響を議論する。

引用文献

- [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察
- [2] A. Zoroddu, F. Bernardini, P. Ruggerone, V. Fiorentini: Phys. Rev. B **64**, 045208 (2001).
- [2] Chris G. Van de Walle, J. Neugebauer: Phys. Rev. Lett. **88**, 066103 (2002).
- [3] C. K. Gan, Y. P. Feng and D. J. Srolovitz: Phys. Rev. B **73**, 235214 (2006).
- [4] Y. Gohda, A. Oshiyama: Phys. Rev. B **78**, 161201(R) (2008).
- [5] M. Suzuki, T. Uenoyama, A. Yanase, Phys. Rev. B **52**, 52,8132 (1995).