格子歪みによる III-V 族窒化物半導体のバンドギャップの変化

Influence of lattice strain on band gaps of III-V nitride semiconductors

三重大院工 [1]，九大応力研 [2]　○河村 貴宏 [1]，浜地 祐矢 [1]，是井 昭人 [1]，
秋山 亨 [1]，寒川 義裕 [2]

Mie Univ.[1], RIAM, Kyushu Univ.[2], ○Takahiro Kawamura[1], Yuya Hamaji[1], Akihito Korei[1], Toru Akiyama[1], Yoshihiro Kangawa[2],

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

はじめに　GaN 系窒化物半導体で構成される混晶や超格子はその組成や構造を変化させることでバンドギャップを制御することが可能である [1]．その際に基板や上下の層との格子不整合による歪みの影響によってもバンドギャップは変化するため，バンドギャップと格子歪みの関係を明らかにすることは重要である．本研究では第一原理計算を用いて GaN 系窒化物半導体混晶および超格子のバンド構造解析を行い，バンドギャップと格子歪みの関係を調べた．

計算方法　計算には第一原理計算プログラム Quantum ESPRESSO[2] を用いた．構造最適化計算において，計算モデルの a 軸方向のセルサイズは拘束し，c 軸方向には自由に緩和させることで基板や上下層の影響による格子歪みを再現した．バンド構造を計算する際には pseudopotential self-interaction correction（pSIC）法 [3,4] による補正を行った．

結果および考察　図 1 と 2 にそれぞれ InN/AlN 超格子の a 軸方向の格子定数 a に対するバンドギャップと c 軸方向の格子定数 c の関係を示す．m 層の InN と n 層の AlN で構成される超格子を mInN/nAlN 超格子と表記している．超格子の層は c 軸に対して垂直である．中空の点は全方向に緩和させた freestanding な場合の値 [5] である．これらの結果から，拘束する格子定数 a が AlN から InN の範囲 (3.09–3.51 Å) では格子定数 a が大きくなるにしたがってバンドギャップは増加すること，また格子定数 c は減少することが分かった．ここで，InN, GaN および AlN のバンドギャップと格子定数の関係から，格子定数が小さい方がバンドギャップが大きい傾向にあると考えられる．今回の計算条件ではバンドギャップと格子定数 c が逆相関関係にあることから，a 軸方向よりも c 軸方向の格子歪みの方がバンドギャップに与える影響が大きいと考えられる．

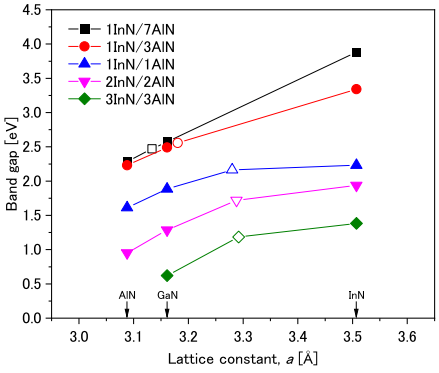

図 1: Band gaps of mInN/nAlN superlattices as a function of lattice constant a.

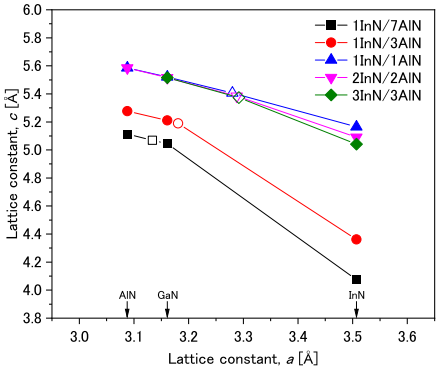

図 2: Lattice constant c of mInN/nAlN superlattices as a function of lattice constant a.

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

[1] I. Gorczyca et al., Superlattice Microstruct. **82**, 438 (2015). [2] P. Giannozzi et al., J. Phys.: Condens. Matter, **29**, 465901 (2017). [3] A. Filippetti et al., Phys. Rev. B **67**, 125109 (2003). [4] M. Wierzbowska et al., Phys. Rev. B **84**, 245129 (2011). [5] T. Kawamura et al., Phys. Status Solidi B 1900530 (2019).

© 2020年 応用物理学会