InN /AIN 超格子のバンドギャップに対する格子歪みの影響 Influence of Lattice Distortion on the Effective Bandgaps of InN/AIN Superlattices 三重大院工¹, 九大応力研² ^O(M2)場崎 航平¹,是井 明人¹,河村 貴宏¹,秋山 亨¹,寒川 義裕² Mie Univ.¹, RIAM, Kyushu Univ.², ^oKouhei Basaki¹, Akito Korei¹, Takahiro Kawamura¹,

Toru Akiyama¹, Yoshihiro Kangawa²

E-mail: 420M141@m.mie-u.ac.jp

AlInN 混晶やInN/AlN 超格子のバンドギャップは、その組成や構造によって大きく変化する[1]. 加えて、格子歪みによってもバンドギャップが変化するため、歪みとバンドギャップの関係性に ついても詳細に検討する必要がある。そこで本研究では、第一原理計算を用いて InN/AlN 超格子 のバンド構造解析を行い、歪みとバンドギャップとの関係を調べた。

解析には第一原理計算プログラム Quantum ESPRESSO[2]を用いた. *m* 層の InN と *n* 層の AlN で 構成される *m*InN/*n*AlN 超格子の計算モデルに対して,二軸方向に歪みをかけてバンド計算を行っ た. Fig. 1 (a), (b)はそれぞれ超格子の境界面が基板に対して垂直なモデル(*a-c* fixed model)と,平 行なモデル(*a-m* fixed model)を表す図である. Fig. 1 (a)では *a*, *c* 軸方向の格子定数を固定し,*m* 軸 方向には格子を緩和させた.一方, Fig. 1 (b)では *a*, *m* 軸の格子定数を固定し,*c* 軸方向の格子を 緩和させた.バンド計算では, pseudopotential self-interaction correction 法[3,4]による補正を行った.

Fig. 2 に *a-c* fixed model における *a* 軸方向の格子定数とバンドギャップの関係を示す. 3InN/1AIN においては, *a* 軸方向の格子定数を 3.00 Å から歪みのない 3.40 Å へと変化させると, バンドギャップは 1.00 eV から 1.40 eV へと増加した. さらに *a* 軸方向の格子定数を増加させると, バンドギャップは減少した. AIN と InN の層数を変化させた場合でも, 圧縮歪みがかかる状態から歪みの ない状態になるに従ってバンドギャップは増加し, 歪みのない状態から引張り歪みが掛かる状態 にかけて, バンドギャップは減少する傾向がみられた.



Fig. 1 (a) *a-c* fixed model and (b) *a-m* fixed model

- [1] T. Kawamura et al., Phys. Status Solidi B, 257, 1900530 (2020).
- [2] P. Giannozzi et al., J. Phys.: Condens. Matter, 29, 465901 (2017).



[4] M. Wierzbowska et al., Phys. Rev. B 84, 245129 (2011).



Fig. 2 Bandgap values of a-c fixed model as a function of lattice constant a. Cross symbols correspond to the cases when the simulation supercells were relaxed in all directions.