

28aB05

ナイトライド半導体の構造安定性への 原子間ポテンシャルの適用

An interatomic potential for nitride semiconductors: application to structural stability

三重大学工学部物理工学科, *学習院大学計算機センター 伊藤智徳, *寒川義裕

Mie University, *Gakushuin University. Tomonori Ito and Yoshihiro Kangawa*

Structural stability of nitride semiconductors is investigated using an empirical interatomic potential applicable to subtle energy difference between zinc blende and wurtzite structures. The calculated results imply that wurtzite structure is more stable than zinc blende structure by 4.5 (meV/atom) and 7.8 (meV/atom) for GaN and InN, respectively. These results agree well with those obtained by *ab initio* calculations.

1. はじめに

GaNを始めとするナイトライド半導体は、バルク状態ではウルツ鉱構造が安定であることが知られている。しかしながら、薄膜状態では基板の種類あるいは面方位を選択することにより、準安定な閃亜鉛鉱構造が出現することも報告されている。その原因としては基板表面上での動的な成長カイネティクス、基板・薄膜界面における原子配列の不整合による影響が考えられるが、これらに対する理論的な検討はほとんど行われていない。これは、ウルツ鉱構造と閃亜鉛鉱構造の間の10(meV/atom)以下という微小なエネルギー差を正しく予測しうる原子間ポテンシャル決定の困難さに起因するところが多い。本研究では、ナイトライド半導体の構造安定性を系統的に検討するための第一段階として、ウルツ鉱構造と閃亜鉛鉱構造の間のエネルギー差を再現しうるエネルギー表式の提案を行う。

2. 原子間ポテンシャル

筆者らは、これまでにイオン性 f_i とイオン電荷 Z_i を考えるだけで、半導体におけるウルツ鉱構造と閃亜鉛鉱構造の間の相対的安定性を系統的に評価しうる表式 $\sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_{i+1}$ を提案し、その簡便さにもかかわらず定量性があることを示してきた[1]。この表式およびこれまで化合物半導体のバルク、界面、表面と広範な問題に適用してきた経験的原子間ポテンシャル V_{ij} [2]を組み合わせ、新たに(1)式を提案する。

$$E = 1/2 \sum_{ij} V_{ij} - \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_{i+1} \quad (1)$$

$$V_{ij} = A \exp[-\beta(r_{ij} - R_i)] [\exp(-\theta r_{ij}) - B_0 \exp(-\lambda r_{ij}) G(\eta) / Z^a]$$

$$J_{ij} = K [3/2(1-f_i) Z_b^2 / r_{bb} - f_i Z_i^2 / r_{ij}]$$

3. 構造安定性への適用

(1)式を用いて計算したGaNのバルク状態での構造安定性の結果を図1に示す。図1においては、凝集エネルギーの計算結果が容積比の関数として示されている。GaNにおいては、ウルツ鉱構造が閃亜鉛鉱構造に比べて4.5(meV/atom)ほど安定であることがわかる。この結果は、第一原理計算結果5.5(meV/atom)と定量的にも一致している。同様の計算をInNについても行った。その結果、InNにおいてはウルツ鉱構造が7.8(meV/atom)ほど安定であること、第一原理計算結果11.4(meV/atom)と良い一致を示すことを明らかにした。以上の結果は、エネルギー表式(1)がさまざまな薄膜/基板界面における構造安定性への十分な適用性を有していることを示している。

文献

[1] T. Ito: Jpn. J. Appl. Phys. **37** (1998) L1217.

[2] T. Ito: Jpn. J. Appl. Phys. **37** (1998) L574.

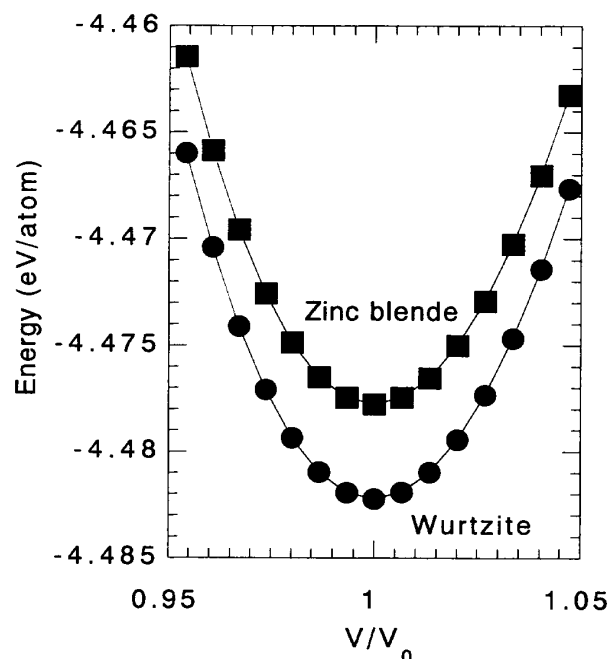


図1 GaNにおける構造安定性。