

1P022 GaN および AlN ナノワイヤーの電子物性に関する第一原理解析

(京大院工) 土井謙太郎, 東楨伸之, 川上佳彦, 中村康一, 立花明知

【要旨】 GaN および AlN のワイヤー構造をモデル化し、第一原理計算によりそれらの電子物性を調べた。Ga または Al 原子と N 原子のそれぞれ 5 個ずつからなる単位格子からは、初期構造の違いにより管状の安定構造を示すものと帯状の安定構造を示すものが得られた。それらの構造に対してバンド計算を行った結果、帯状の構造で大きなバンドギャップが見られたが、管状の構造のバンドギャップは非常に小さいことがわかった。帯状の構造では 4 配位の結合が多く見られ、管状の構造では多数のダングリングボンドがあると考えられることからバンドギャップの違いが考えられるが、我われはその違いについて量子エネルギー密度の観点から考察を行った。

【序論】 窒化物半導体の微細構造が合成されるようになり、従来の発行ダイオード(LED)に加え、さらなる応用面で注目を集めている。近年、Goldberger らのグループが GaN ナノチューブの合成に成功し[1]、また、Lee らのグループは GaN ナノチューブの中に GaP ナノワイヤーの合成に成功した[2]。それらの応用面については、Huang らのグループが電界効果トランジスタ(FET)のソース-ドレイン間のチャンネル部に GaN ワイヤーを張り、I-V 特性を測定した結果の報告などがある[3]。このように、さまざまな面での応用を考えるとときに重要となるのがその物質の持つ物性である。LED や FET ではそれぞれが求める物性は異なり、特に半導体の持つエネルギーバンドギャップの制御が重要になってくる。我われはこれまでに、GaN と AlN のワイヤー構造の簡単なモデルに対して、第一原理計算によりそれらの電子物性を調べた[4]。その結果、GaN および AlN ワイヤーのそれぞれのバンドギャップが 0.07eV および 0.40eV となり、結晶構造のバンドギャップに対してかなり小さな値になることが明らかになった。このことから、ワイヤー構造の制御によりバンドギャップが制御できるならば、ワイヤー構造に広範囲での応用が期待できる。今回は、GaN と AlN のワイヤー構造とエネルギーバンドギャップの比較、さらに量子エネルギー密度[5-8]を用いた密度分布の解析結果を報告する。

【計算方法】 図 1 に計算に用いた 2 種類のモデルの初期構造を示す。閃亜鉛鉱型の結晶構造を基にした初期構造に対して構造最適化を行った上で、バンド計算を行う。GaN および AlN ワイヤーモデルともに単位格子あたり Ga_5N_5 および Al_5N_5 の原子を含む。計算には密度汎関数法(DFT)を用い、交換相関項の汎関数には一般化勾配近似(GGA)、擬ポテンシャルにはノルム保存型擬ポテンシャルを用いた。平面波により波動関数を展開し、周期境界条件を課している。エネルギーカットオフは GaN については 520eV、AlN については 400eV とした。

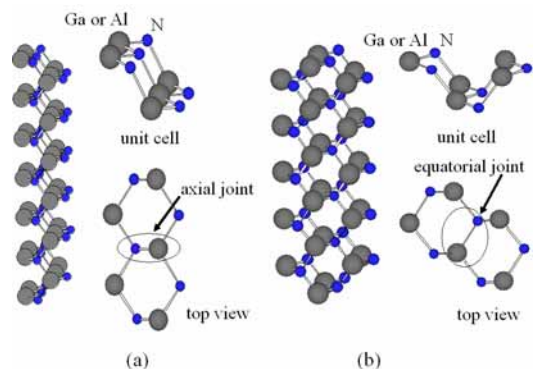


図 1 .ワイヤーの初期構造。(a)を axial joint モデル、(b)を equatorial joint モデルとする。

【結果および考察】 構造最適化の結果、GaN および AlN とともに axial joint モデルからは帯状構造が得られ、equatorial joint モデルからは管状構造が得られた。図 2 に AlN のそれぞれの最適構造に対するバンド計算の結果を示す。AlN の帯状構造では 2.79eV の直接バンドギャップが見られ、一方、管状構造

では 0.16eV の直接バンドギャップが見られた。これらのバンドギャップの違いはそれらの構造に依存するところが大きいと考えられる。帯状構造では Al 原子と N 原子の結合の多くが 4 配位になっているが、管状構造は 3 配位の結合からなっている。この違いにより、帯状構造のバンドギャップは管状構造のバンドギャップよりかなり大きなものになっている。一方、閃亜鉛鉱型 AlN の結晶構造のバンドギャップは 3.09eV となり[4]、帯状構造のバンドギャップは結晶の値に近くなっている。図 3 は GaN ワイヤの管状構造の軸方向に垂直な断面において、運動エネルギー密度と張力密度[5-8]をプロットしたものである。運動エネルギー密度のプロットにより、電子密度とは違った描像が得られ、電子が古典的に運動する領域が明らかにできると考えられる。また張力密度を見ることにより、平衡状態において各点の電子に働く力のつりあい関係が明らかになる。

【謝辞】本研究の一部は、21世紀COEプログラム「動的機能機械システムの数理モデルと設計論」によるものである。

【参考文献】

- [1]J. Goldberger, R. He, Y. Zhang, S. Lee, H. Yan, H.-J. Choi, and P. Yang, Nature **422**, 599 (2003).
- [2]M. W. Lee, H. C. Hsuef, H.-M. Lin, and C.-C. Chen, Phys. Rev. **B67**, 161309, (2003).
- [3]Y. Huang, X. Duan, Y. Cui, and C. M. Lieber, Nano Lett. **2**, 101 (2002).
- [4]Y. Kawakami, N. Higashimaki, K. Doi, K. Nakamura, and A. Tachibana, Phys. Stat. Sol. (c) **0**, 2318 (2003).
- [5]A. Tachibana, J. Chem. Phys. **115**, 3497 (2001).
- [6]A. Tachibana, in: S. P. Baker (ed.), Stress Induced Phenomena in Metallization (American Institute of Physics, New York, 2002), pp. 105-116.
- [7]A. Tachibana, in: K. D. Sen (ed.), Review in Modern Quantum Chemistry: A Celebration of the Contributions of Robert Parr (World Scientific, Singapore, 2002), Chap. 45, pp. 1327-1366.
- [8] A. Tachibana, in: E. Brändas and E. Kryachko (eds.), Fundamental World of Quantum Chemistry: A Tribute to the Memory of Per-Olov Löwdin, Vol. 2 (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2003), pp. 211-239.

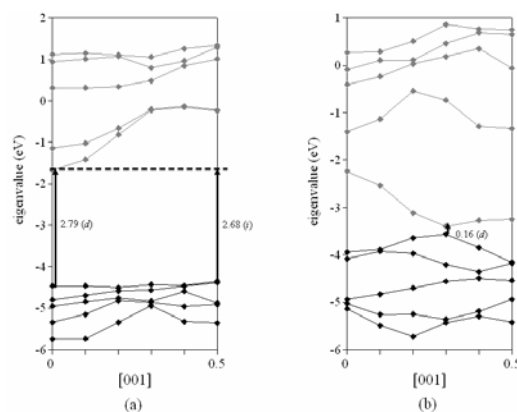


図2 . AlN ワイヤ構造のバンドギャップ。(a)は帯状の安定構造のものであり、(b)は管状の安定構造のものである。

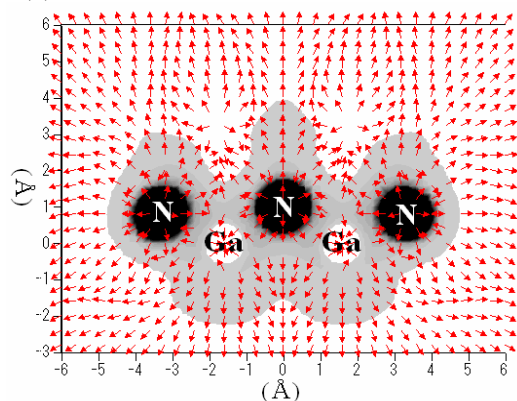


図3 . GaN ワイヤの axial joint モデルの安定構造に対する運動エネルギー密度と張力密度のプロット