

1 化合物半導体の安定性と積層欠陥エネルギー

1.1 背景

Zincblende 構造 (ZB) と Wurtzite 構造 (WZ) の積層欠陥部は、それぞれ WZ と ZB を有している。したがって積層欠陥エネルギー (γ') は、ZB と WZ の構造エネルギー差 (ΔE_{ZB-WZ}) と密接に相関していることが知られている。また、図 1 に示すように、竹内、鈴木によって実験的に得られた γ' は、有効電荷 e^* および WZ の c/a 比 に強い相関をもつことが報告された。本節では γ' と、我々が第一原理計算で求めた ΔE_{ZB-WZ} との依存性、および ΔE_{ZB-WZ} と WZ の c/a 比との依存性を調べ、ZB と WZ の安定性について検討した。

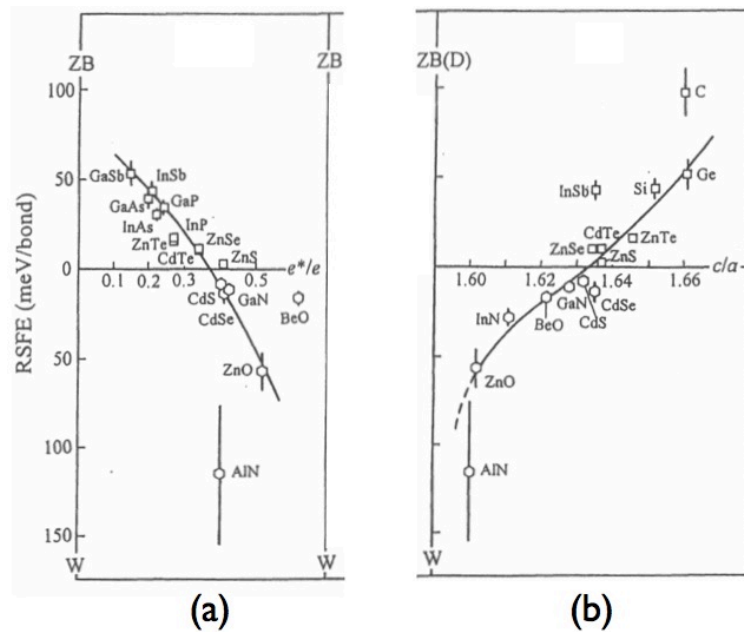


図 1: 積層欠陥エネルギー (γ') との相関。(a) 有効電荷 e^* , (b) WZ 構造の c/a 比。

1.2 計算モデル

III-V 族半導体、II-VI 族半導体から成る ZB と WZ のユニットセルを作り、第一原理計算ソフト VASP を用いてそれぞれのエネルギーを計算し、 ΔE_{ZB-WZ} および WZ の c/a 比を求めた。また、これらの結果から ZB と WZ の安定性について調べた。計算条件として、エネルギーが精度よく再現されるように、カットオフエネルギーを 1000 eV に設定した。

1.3 計算結果と議論

図 2 に、実験で得られた γ' と、我々が計算で求めた ΔE_{ZB-WZ} との相関関係を示した。 γ' と ΔE_{ZB-WZ} は正の相関を示しており、これらの値の間には、線形近似が成り立つことを期待させる。しかし、これらの相関はそれほど高くない。これは、積層間の相互作用が単純な 2 層間の相互作用だけで決定しないことを示唆している。また、CdSe に関しては、実験的に得られた安定構造を再現しておらず、矛盾が生じた。この矛盾に関しては、VASP の計算精度を再検討する必要がある。

図3に、我々が計算で求めた ΔE_{ZB-WZ} と WZ の c/a 比 との相関関係を示した。この結果から、 ΔE_{ZB-WZ} と WZ の c/a 比との間には線形近似が成立した。また、ZB については理想的な軸比 $c/a = 1.633$ よりも大きいこと、WZ においては小さいことが示され、実験結果と整合した。これは図1(b)に示した γ' と c/a 比の関係と、図2に示した γ' と ΔE_{ZB-WZ} の関係から、理解できる。以上より、 γ' と ΔE_{ZB-WZ} との相関性、および ZB と WZ の安定性は、第一原理計算により求めた ΔE_{ZB-WZ} や c/a 比からアプローチを行うことで議論できることを示唆している。

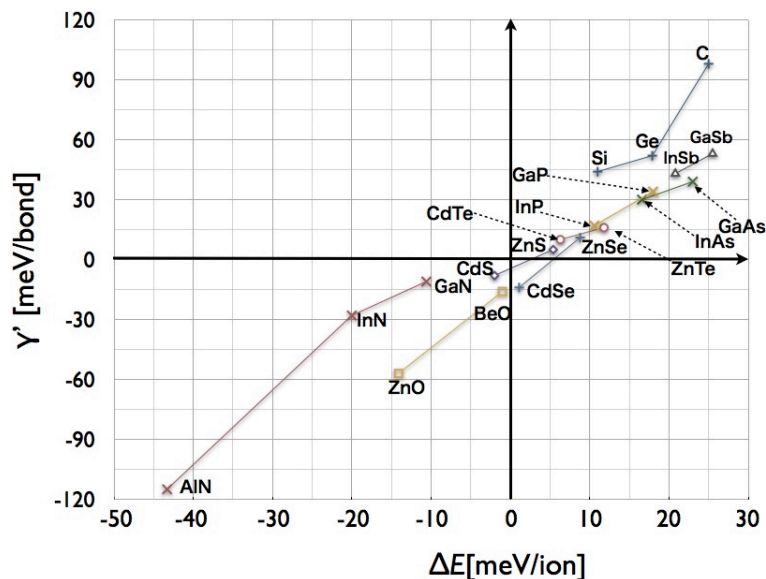


図 2: 積層欠陥エネルギー (γ') と、ZB と WZ の構造エネルギー差 (ΔE_{ZB-WZ}) との相関。

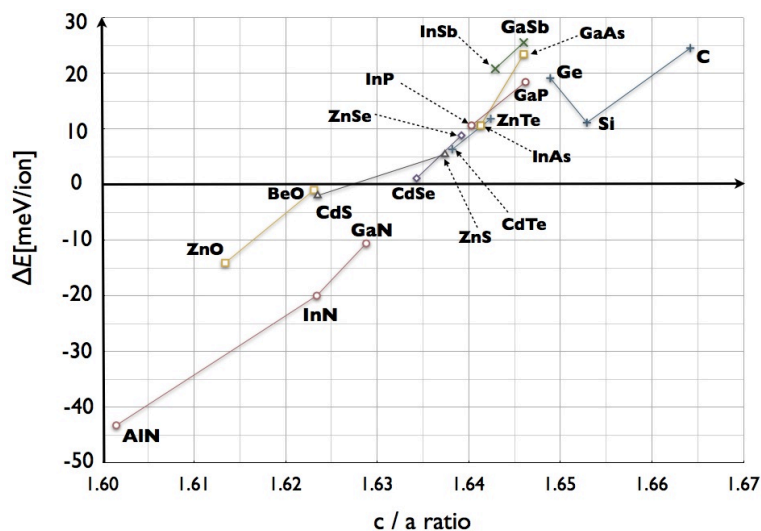


図 3: 構造エネルギー差 (ΔE_{ZB-WZ}) と、WZ の c/a 比 との相関。

引用文献

- [1] S. Takeuchi, and K. Suzuki, " Stacking Fault Energies of Tetrahedrally Coordinated Crystals, " Phys. Stat. Sol., (a) 171 (1999), 99-103.