

▼ \subsection{化合物半導体の安定性と積層欠陥エネルギー}

▼ \paragraph{背景}

- ▼ 第一原理計算は種々の元素に対して、汎用に計算精度が確保できるところが利点である。ここでは、第一原理計算で求めた化合物半導体の安定性と、実験的に求まっている積層欠陥エネルギーを比較し、計算精度がどの程度であるかを検証した例を報告する。

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 ($\Delta E_{\text{ZB-WZ}}$) と高い相関がある。また、図\ref{RSFE}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 と強い相関をもつことが報告されている。

- \begin{figure}[htbp]
 \begin{center}
 \includegraphics[width=10.0cm,bb=0 0 642 532]{masaki/Figure/RSFE.jpg}
 \caption{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. }
 \label{RSFE}
 \end{center}
 \end{figure}

▼ \paragraph{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、 $\Delta E_{\text{ZB-WZ}}$ 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1000eVに設定した。

▼ \paragraph{計算結果と議論}

- 図\ref{SF_result}に、実験で得られた γ と、我々が計算で求めた $\Delta E_{\text{ZB-WZ}}$ との相関関係を示した。 γ と $\Delta E_{\text{ZB-WZ}}$ 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\ref{c_a_ratio}に、我々が計算で求めた $\Delta E_{\text{ZB-WZ}}$ とWZの c/a 比 との相関関係を示した。この結果から、 $\Delta E_{\text{ZB-WZ}}$ 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\ref{RSFE}(b)に示した γ と c/a 比の関係と、図\ref{SF_result}に示した γ と $\Delta E_{\text{ZB-WZ}}$ の関係から、理解できる。以上より、 γ と $\Delta E_{\text{ZB-WZ}}$ 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 $\Delta E_{\text{ZB-WZ}}$ 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。

- \begin{figure}[htbp]
 \begin{center}
 \includegraphics[width=10.0cm,bb=0 0 808 613]{./masaki/Semiconductor_Compounds/Figure/SF_result.jpg}
 \caption{積層欠陥エネルギー(γ)と、ZBとWZの構造エネルギー差($\Delta E_{\text{ZB-WZ}}$)との相関. }
 \label{SF_result}
 \end{center}
 \end{figure}
 \begin{figure}[htbp]
 \begin{center}
 \includegraphics[width=10.0cm,bb=0 0 939 651]{./masaki/Semiconductor_Compounds/Figure/c_a_ratio.jpg}
 \caption{構造エネルギー差($\Delta E_{\text{ZB-WZ}}$)と、WZの c/a 比 との相関. }
 \label{c_a_ratio}
 \end{center}
 \end{figure}

▼ \paragraph{引用文献}