

## 化合物半導体の積層欠陥エネルギーと構造エネルギー差

関西学院大・理工 ○正木佳宏（院生），山本洋介（院生），西谷滋人  
東北大・金研 米永一郎

【緒言】閃亜鉛鉱（ZB）構造とウルツ鉱（W）構造の積層欠陥部は、それぞれW構造とZB構造を有している。つまり、積層欠陥エネルギーはZB構造とW構造とのエネルギー差に密接に関連している。しかし、このエネルギー差を実験的に求めることは難しい。本研究では、第一原理計算によりZB構造とW構造とのエネルギー差を求め、それと実験的に得られている積層欠陥エネルギー<sup>1)</sup>との相関を調べた。

【手法】本研究では、第一原理計算ソフトVASPを用いてエネルギーを求めた。エネルギー差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。

【結果】積層欠陥エネルギー（ $\gamma'$ ）は、ZB構造とW構造のエネルギー差（ $\Delta E$ ）に対して、図1の通り正の相関を示している。しかし、CdSeは実験的に得られている安定な構造を再現していない。また、それらの相関は期待したほど強くない。これらの不一致について考察をすすめている。

1) S.Takeuchi, and K.Suzuki, Phys. Stat. Sol., (a)171 (1999), 99-103.

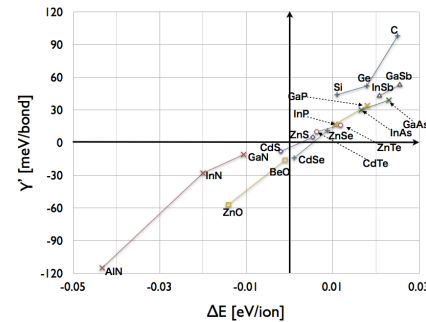


図1 積層欠陥エネルギー（ $\gamma'$ ）と、ZB構造とW構造のエネルギー差（ $\Delta E$ ）との相関。