



シュプリングァー・マテリアルズ

SpringerMaterials

Consult an Expert!

世界で最も大きな物理・化学・工学分野のファクトデータベース

検索事例集

- 事例 1. 半導体レーザー材料とそれら発光波長を調べる ————— •P.2
- 事例 2.1 窒化ガリウムの電子の有効質量を調べる ————— •P.4
- 2.2 窒化アルミニウムの電子の有効質量を調べる ————— •P.5
- 2.3 窒化ガリウムの誘電率を調べる ————— •P.5
- 事例 3.1 各種金属の炭素の溶解度を調べる ————— •P.6
- 3.2 グラフェンのラマンスペクトルに関するデータを調べる ————— •P.7
- 3.3 層状物質 MoS₂ の光電子スペクトルを解析するため ————— •P.8
 電子状態に関するデータを調べる

研究だけでなく教材にも
 グラフプロットのためのデータも
 簡単に検索できます!

化合物半導体材料の格子定数とバンドギャップ
 (事例1.より)

新URL materials.springer.com



シュプリングァー・ネイチャー インスティテューショナル・マーケティング

● Tel: 03-4570-6710 ● Fax: 03-3267-8746 ● Email: market@springer.jp ● Website: www.springer.com / www.springer.jp

● Twitter: twitter.com/SpringerJapan ● Facebook: facebook.com/SpringerJapan ● YouTube: youtube.com/SpringerJapanVideos

▶ 動画もみられます

youtube.com/SpringerJapanVideos

YouTube



事例 1.

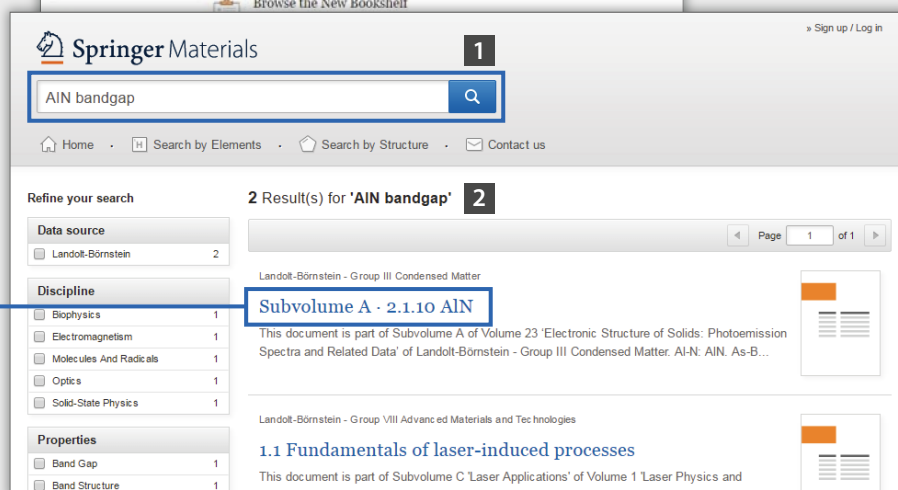
半導体レーザー材料とそれら発光波長を知りたい。そこで、材料の窒化物半導体の格子定数とバンドギャップを調べる。具体的には窒化アルミニウム (AlN)、窒化ガリウム (GaN)、窒化インジウム (InN) の三種類を対象とした。研究上、GaNとInNのバンドギャップはそれぞれ3.4eV、0.7eVと覚えているので、調べる必要はない。

1. AlNのバンドギャップと格子定数

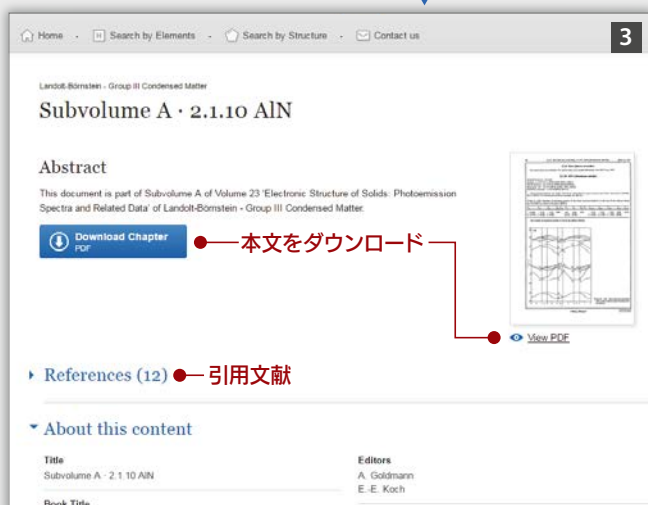
1 キーワード **AlN bandgap** で検索する。



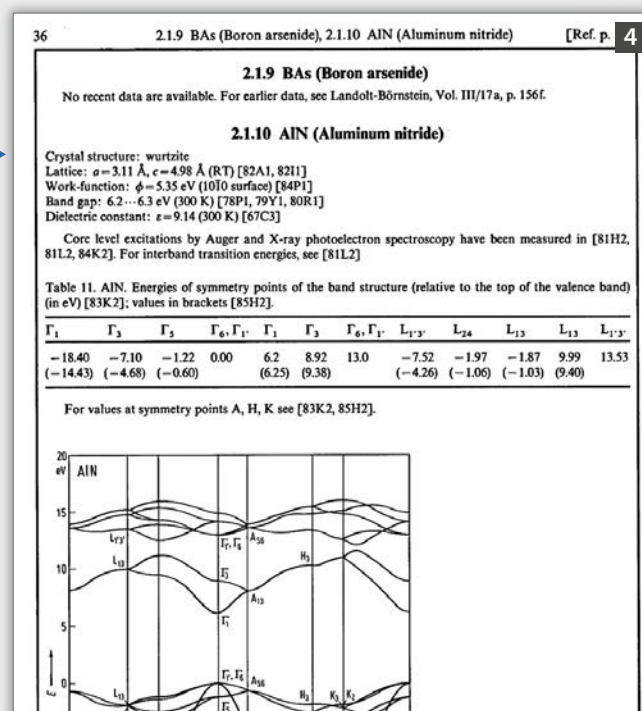
2 検索結果が表示される。



3 抄録ページ



4 AlNについての本文をダウンロードすると、lattice constant $a=0.31\text{nm}$, $c=0.50\text{nm}$, bandgap 6.2eV とわかる。



2. GaNの格子定数

- 1 キーワード“**GaN lattice parameters**”で検索する。
- 2 検索結果のうち、**Gallium nitride (GaN) lattice parameters, thermal expansion**をクリック。

GaN: lattice parameters			
<i>a</i>	3.160(8)	experimental, powder	36S,37L
<i>c</i>	5.125(10)		
<i>c/a</i>	1.622(6)	X-ray diffraction	38J
<i>a</i>	3.180(4)		
<i>c</i>	5.166(5)		
<i>c/a</i>	1.625		
<i>a</i>	3.189	RT	X-ray diffraction, single crystals and powder
<i>c</i>	5.185		
<i>c/a</i>	1.626		
<i>a</i>	3.1886(6)		X-ray diffraction, powder
<i>c</i>	5.186(4)		71M
<i>a</i>	3.160(8)		powder X-ray diffraction
<i>c</i>	5.125(10)		73L
<i>c/a</i>	1.622(6)		
<i>a</i>	3.186(3)		X-ray diffraction, powder
<i>c</i>	5.181(3)		73S

- 3 本文に立方晶 (zinc-blende) 構造と2ページ目に六方晶 (Wurtzite) 構造での値が示されている。安定相となる六方晶構造の値は $a=0.32\text{ nm}$ 、 $c=0.51\text{ nm}$ とわかる。

3. InNの格子定数

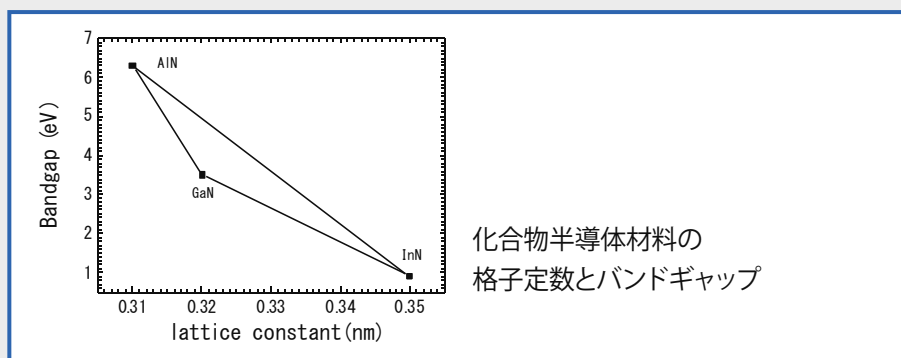
- 1 キーワード“**InN lattice parameters**”で検索する。
- 2 検索結果のうち、**Indium nitride (InN) lattice parameters, thermal expansion**をクリック。

InN: lattice parameters			
<i>a</i>	3.533(4)	X-ray diffraction, crystal	38J
<i>c</i>	5.693(4)		
<i>c/a</i>	1.611	X-ray diffraction, crystal	70M
<i>a</i>	3.54		
<i>c</i>	5.71	RT	X-ray diffraction, sputtered InN film
<i>a</i>	3.544		75O
<i>c</i>	5.718		
<i>c/a</i>	1.6090		
<i>a</i>	3.5446		X-ray diffraction, CVD InN film
<i>c</i>	5.7034		78P
<i>c/a</i>	1.6090		
<i>a</i>	3.5480(5)		X-ray diffraction, InN film
<i>c</i>	5.7600(5)		86T
<i>c/a</i>	1.6234		
<i>a</i>	3.540		X-ray diffraction, InN film on sapphire
<i>c</i>	5.705		89K
<i>a</i>	5.69		RHEED, film on sapphire
<i>a</i>	3.536		ab-initio pseudopotential LDA calculation
<i>c</i>	5.709		92Y
<i>c/a</i>	1.615		

- 3 本文に六方晶 (Wurtzite/hexagonal) 構造での値が示されている。安定相となる六方晶構造の値は $a=0.35\text{ nm}$ 、 $c=5.7\text{ nm}$ とわかる。

4. 結果

以上の検索結果を基にグラフを作成。光源や太陽電池を作る際に、窒化物を使えば赤外、可視、紫外まで対応可能であることがわかる。



化合物半導体材料の格子定数とバンドギャップ

▶ 動画もみられます

youtube.com/SpringerJapanVideos

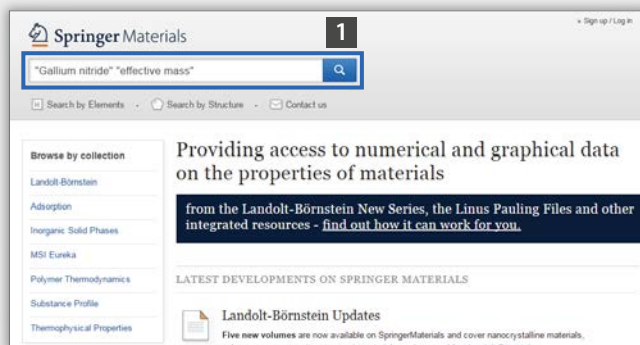
YouTube



事例 2.1

理論計算に用いるパラメータとして、電子の有効質量を「適切に」設定するため、窒化ガリウム (GaN) の電子の有効質量を調べる。

1 キーワード“Gallium nitride” “effective mass” で検索する。



2 検索結果のうち、“GaN, effective masses, g-factors, deformation potentials”をクリック。



3 本文をダウンロードすると、1ページ目に、1998年まで (Referencesより) の計算値や実験値が列挙される。

substance: gallium nitride (GaN)
property: effective masses, g-factors, deformation potentials
conduction band, effective masses

α -GaN:
Values are given for polaron mass. Taking the Fröhlich coupling constant $\alpha = 0.49$ [97M5] the difference between the polaronic and bare electron mass is 10%.

m_n	0.22 m_0	$T = 6$ K	cyclotron resonance, see Fig. 5	95D
	0.22 m_0	$T = 4$ K	no anisotropy resolvable	
			Zeeman spectroscopy of shallow donors, see Fig. 6	97M2
$m_{n }$	0.18 m_0		calculated value	97M1
	0.19 m_0		calculated value	97K
	0.20 m_0		calculated value	96C1
	0.19 m_0		calculated value	98Y
$m_{n\perp}$	0.20 m_0		calculated value	97M1
	0.23 m_0		calculated value	97K1
	0.18 m_0		calculated value	96C1
	0.17 m_0		calculated value	98Y
m_n	0.27(6) m_0	$T = 300$ K	Faraday rotation	74R
	0.22(3) m_0			75P
	0.22 m_0		conduction band polaron mass	73I
	0.4 m_0		infrared reflection, Fig. 1	70M2
	0.28 m_0	$T = 300$ K	from Seebeck effect, acoustic phonon scattering assumed, impurity scattering assumed; for dependence on electron concentration, see Fig. 2	76S
	0.1 m_0	$n = 2.3 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$	fit of reflectance spectrum	76S
$m_{n\perp}$	0.20(2) m_0			73B
$m_{n }$	0.20(6) m_0			

4 検索結果のうち、“GaN, hexagonal modification: effective-mass parameters”には、最初の表に1996年～2006年 (Referencesより) の新しいデータが記載されているのがわかる。

GaN, hexagonal modification: effective-mass parameters

GaN, hexagonal modification: effective-mass parameters
Data extract from Landolt-Börnstein III/44A: Semiconductors – New Data and Updates for I-VII, III-V, III-VI and IV-VI Compounds

substance: gallium nitride (GaN), hexagonal modification
property: effective-mass parameters (electronic properties)

conduction band effective masses
(in units of m_0)
Cited values are polaron masses. Taking the Fröhlich coupling constant $\alpha = 0.49$ [97M], the difference between the polaronic and bare electron mass is 10%.

Physical property	Numerical value	Experimental conditions	Experimental methods, remarks	Ref.
m_c	0.230	$T = 4.2$ K	cyclotron resonance	97K
	0.222	$T = 4.5$ K	magneto-optic, see Fig. 1	99W
	0.19	$T = 1.5$ K	magnetotransport	00W
$m_n^{ }$	0.208	$T = 4.2$ K	cyclotron resonance	03S
	0.228	$T = 300$ K	infrared ellipsometry	00K
m_n^{\perp}	0.19		calculated value	06R
	0.237	$T = 300$ K	infrared ellipsometry	00K
	0.212		calculated value	06R

valence band effective masses

5 結果

窒化ガリウムの電子の有効質量は、以前から約0.2であると知っていたが、SpringerMaterialsで調べた結果、「0.208」「0.222」「0.230」といった報告例があることが短時間で判明した。

▶ 動画もみられます

youtube.com/SpringerJapanVideos

YouTube



3 本文をダウンロードすると
conduction band effective
massesの計算値が列挙される。

substance: aluminum nitride (AlN) property: effective masses, valence band parameters			
conduction band effective masses			
m_{all}	0.33 m_0	calculated value	96C
	0.33 m_0	calculated value	95S
	0.35 m_0	calculated value	97K
	0.32 m_0	calculated value	97M
m_{nL}	0.25 m_0	calculated value	96C
	0.25 m_0	calculated value	95S
	0.35 m_0	calculated value	97K
	0.33 m_0	calculated value	97M
valence band effective masses (excluding spin-orbit effects)			
m_{AII}	3.53 m_0	calculated value	97K
	3.53 m_0	calculated value	95S
	3.57 m_0	calculated value	97M
m_{ALI}	11.14 m_0	calculated value	97K
	10.42 m_0	calculated value	95S
	20.00 m_0	calculated value	97M
m_{BI}	3.53 m_0	calculated value	97K
	3.53 m_0	calculated value	95S
	3.57 m_0	calculated value	97M

事例 2.2

理論計算に用いるパラメータとして、電子の有効質量を「適切に」設定するため、窒化アルミニウム (AlN) の電子の有効質量を調べる。

- 1 キーワード“aluminum nitride”“effective mass”で検索する。
- 2 検索結果のうち、**AlN, effective masses, valence band parameters**をクリック。

4 結果

窒化アルミニウムの(伝導帯の)電子の有効質量として、「0.25」「0.35」「0.33」といった報告例があることが短時間で判明した。

▶ 動画もみられます

youtube.com/SpringerJapanVideos

YouTube



3 本文をダウンロードすると、
1ページ目に、**low-frequency dielectric constant (α -GaN)**の
実験値や計算値が列挙されている。

substance: gallium nitride (GaN) property: dielectric constants			
low-frequency dielectric constant (α -GaN, wurtzite structure)			
$\epsilon_{\perp}(0)$	12(2)	RT	infrared reflectivity
$\epsilon_{\parallel}(0)$	12(2)		
$\epsilon_{33}(0)$	10.4(3)	$T = 300$ K	infrared reflectivity, film on sapphire
$\epsilon_{11}(0)$	9.5(3)		
$\epsilon_{\perp}(0)$	9.8(3)	$T = 300$ K	infrared reflectivity
$\epsilon_{\parallel}(0)$	8.9(3)		
$\epsilon_{\perp}(0)$	9.28	RT	calculated from Raman and IR data, film on sapphire
$\epsilon_{\parallel}(0)$	10.1		shell model potential calculation
$\epsilon_{11}(0)$	8.05		
$\epsilon_{33}(0)$	11.20		
$\epsilon_{33}(0)$	10.28		ab-initio polarization method
$\epsilon_{\perp}(0)$	9.04		from infrared reflectivity data
For model-potential calculations, see [99C].			
low-frequency dielectric constant (β -GaN, zincblende structure)			
$\epsilon(0)$	8.88		shell-model potential calculation
pressure dependence of the low-frequency dielectric constant (β -GaN, zincblende structure)			
$d\epsilon(0)/dp$	-6.9 Mbar ⁻¹		bond-orbital calculation

事例 2.3

理論計算に用いるパラメータとして、窒化ガリウム (GaN) の誘電率を調べる。

- 1 キーワード“gallium nitride”“dielectric constant”で検索する。
- 2 検索結果のうち、“GaN, dielectric constants”をクリック。

4 結果

窒化ガリウムの誘電率(低周波数、垂直方向)として、実験値「9.04」や計算値「10.28」など、多くの報告例があることが短時間で判明した。

▶ 動画もみられます

youtube.com/SpringerJapanVideos

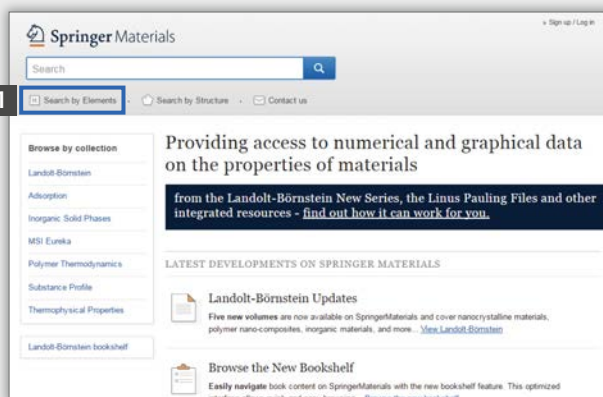
YouTube



事例 3.1

化学気相成長 (CVD) 法によるグラフェンの作製において、触媒金属種の選択のため、各種金属の炭素の溶解度を調べる (例、Cu 触媒の炭素溶解度)。

1 Search by Elements を選択する。



2 周期表 (Periodic Table) の中で、炭素 (C) と金属 (例えば Cu) をクリックする。

3 "C-Cu" を選択すると、下部に検索結果一覧が表示される。

4 検索結果のうち、"C-Cu (Carbon-Copper)" を選択すると、炭素と Cu の相図が得られる。

Search by Elements

Search for information by element system

Your Selection
C-Cu

308 Matching element systems

C-Cu (4) 3

4 Result(s) for 'C-Cu'

Landolt-Börnstein - Group IV Physical Chemistry

C-Cu (Carbon-Copper) 4

Landolt-Börnstein - Group III Condensed Matter

Elements, Borides, Carbides, Hydrides · CoNbC - FeC

C-Cu (Carbon-Copper)

First reliable determinations of the solubility of C in liquid Cu have been performed by Baukloh et al. [37Bau1]. Later on these results were corroborated by Fischer et al. [56Fis1]. The liquidus for this system given in "Metals Handbook" [73ASM1] up to = 1970 K has been redrawn by Massalski [86Mas1] and also has been taken for Fig. 1.

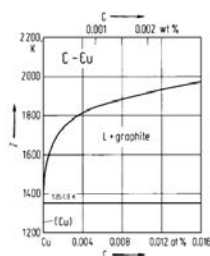


Fig. 1. C-Cu. Partial phase diagram (Cu-rich part).

References

- 37Bau1 Baukloh, W., Springer, F.: Z. Anorg. Chem. **230** (1937) 315.
 56Fis1 Fischer, J., Schmidt, W.: Z. Erzbergbau Metallhüttenwes. **9** (1956) 248.
 73ASM1 „Metals Handbook, Metallurgy, Structures and Phase Diagrams“, Vol. 8, 8th ed., T. Lyman (ed.), ASM, Metals Park, Ohio, 1973.

5 結果 1000 °C では、0.001wt% 以下の溶解度であることが判明した。

▶ 動画もみられます

youtube.com/SpringerJapanVideos

YouTube



事例 3.2

CVD法で作製したグラフェンの評価のため、グラフェンのラマンスペクトルに関するデータを調べる。

1 キーワード“**graphene Raman**”を検索する。

2 検索結果のうち、**Raman Spectroscopy for Characterization of Graphene**を選択し、本文をダウンロードする。

3 結果
グラフェンのラマンスペクトルに関する文献が得られる。

▶ 動画もみられます

youtube.com/SpringerJapanVideos

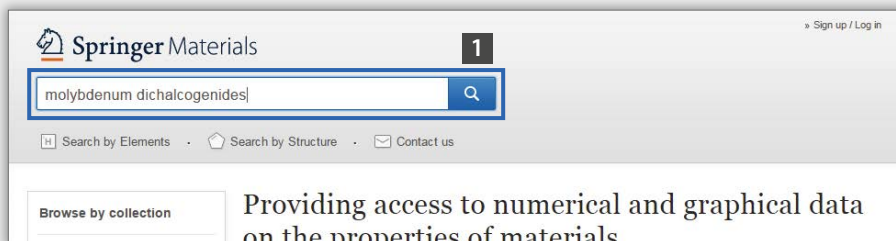
YouTube



事例3.3

層状物質、二硫化モリブデン (MoS_2) の光電子スペクトルを解析するため、電子状態に関するデータを調べる。

1 キーワード **molybdenum dichalcogenides** と入力する。



2 Properties にある **photoemission** を選択する。

3 **結果**
本文をダウンロードすると、光電子スペクトルやエネルギーバンド構造の文献が表示される。

*2016年3月時点のスクリーンショットです。実際の画面とは異なる場合があります。

アブストラクトはどなたでも閲覧できます。

本文のダウンロードやレファレンス情報の閲覧には、ご契約が必要です。

materials.springer.com

お問い合わせは

シュプリンガー・マテリアルズに関するお問い合わせは

シュプリンガー・ネイチャー インスティテューショナル・マーケティング

• Email: market@springer.jp

• Tel: 03-4570-6710 • Fax: 03-3267-8746

詳しい資料をシュプリンガー・ジャパンのホームページにご用意しています。

• springermaterials.jp (日本語情報ページ)

• springer.com/springermaterials (英語情報ページ)