

ScAlMgO₄/GaN 界面構造の安定性に対する量子論的アプローチ: Sc-O 劈開面での検討 Ab initio-based approach for the stability of ScAlMgO₄/GaN interface: effect of Sc-O cleavage surface

三重大院工, ○中根 晴信, 秋山 亨, 中村 浩次, 伊藤 智徳

Mie University ○Harunobu Nakane, Toru Akiyama, Kohji Nakamura, Tomonori Ito

E-mail: 415m614@m.mie-u.ac.jp

【はじめに】 ScAlMgO₄ は格子定数 a や熱膨張係数が GaN と近いことから GaN を成長させる際の基板としての利用が期待されている。特に近年、ScAlMgO₄ 基板を用いた有機金属エピタキシャル法により高品質な GaN のエピタキシャル成長が報告されている[1-4]。これまでに我々は、Al/Mg-O 劈開面を仮定した場合での、ScAlMgO₄ 基板上に形成される GaN 薄膜の極性および界面構造を、第一原理計算を用いて算出した界面エネルギーにもとづいて検討し、界面に窒素が挿入された N 極性となる界面が安定となることを見出した[5]。本研究では、Ga 極性の GaN が形成されると考えられる Sc-O 劈開面も考慮した場合での ScAlMgO₄ 基板と GaN 薄膜との界面における界面エネルギーを第一原理計算にもとづき算出し、その極性および界面構造を決定する要因を明らかにする。

【結果および考察】 Fig.1 は Sc-O 層を劈開面に持つ ScAlMgO₄(0001)基板上に Ga 極性および N 極性の GaN 薄膜が形成した場合での界面のモデルを考え、それぞれの界面エネルギーを Ga の化学ポテンシャル μ_{Ga} の関数として示したものである。Ga 極性の GaN 薄膜が形成する ScAlMgO₄/GaN 界面では理想界面(ideal interface)が μ_{Ga} に依存せず安定となり、一方 N 極性の GaN 薄膜が形成する ScAlMgO₄/GaN 界面では N 原子が加わった構造(N-adatom)が安定となる。さらに、これら異なる極性の GaN 薄膜における界面エネルギーを比較すると、常に N 極性の GaN 薄膜における界面エネルギーが低くなり、この計算結果からは Al/Mg-O 劈開面の場合と同様[5]に、N 極性の GaN 薄膜が Ga 極性に比べて安定となる。そして、その安定性はエレクトロンカウンティング則[6]および安定な N-Sc ボンドの形成に起因している。以上

の計算結果から、ScAlMgO₄(0001)基板上における Ga 極性の GaN の形成[4]は、界面での安定性に加え GaN 表面での安定性および成長過程に因るものと考えられる。

【参考文献】 [1] T. Ozaki *et al.*, Appl. Phys. Express 7, 091001 (2014). [2] T. Ozaki *et al.*, Appl. Phys. Express 8, 062101 (2015). [3] 岩渕他: 第 61 回春季応物学会(2014) 18a-E13-8. [4] 花田他: 第 61 回春季応物学会(2014) 18a-E13-9. [5] 中根他: 第 63 回春季応物学会(2016) 21a-H121-9. [6] M. D. Pashley *et al.*, Phys. Rev. Lett. 60, 2176 (1988).

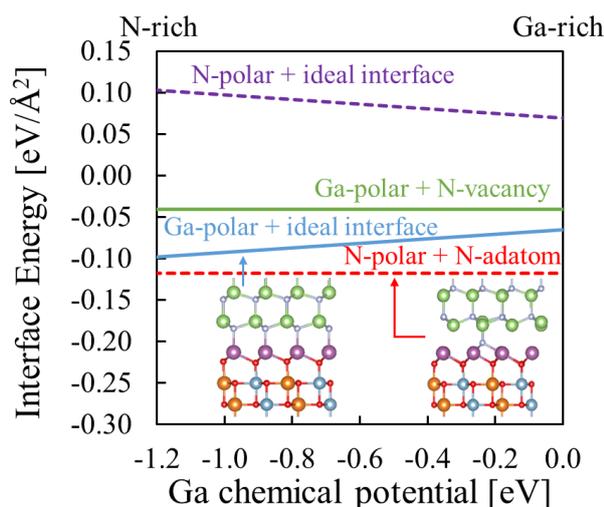


Fig.: Calculated interface energy of GaN thinfilm on ScAlMgO₄ substrate with Sc-O cleavage surface as a function of Ga chemical potential. Solid and dashed lines represent interface energies for Ga-polar and N-polar GaN thin films on ScAlMgO₄ substrate, respectively. Atomic configurations are also shown.