AIN における酸素起因極性反転の理論的検討

Role of oxygen atoms on polarity inversion of N-polar AlN buffer layers: a first-principles study 三重大院工¹, 三重大地域イノベ², ^O内野基¹, 秋山亨¹, 中村浩次¹, 伊藤智徳¹, 三宅秀人^{1,2}, 平松和政¹ Mie Univ.¹, RIS.², Mie Univ.,

^oM. Uchino, T. Akiyama, K. Nakamura, T. Ito, H. Miyake^{1,2}, K. Hiramatsu¹ E-mail: 416m603@m.mie-u.ac.jp

【はじめに】AIN は広いバンドギャップと高い熱伝導率を持つことから深紫外発光デバイスへの 応用が期待されている。一般的に AIN は AI 極性(c 面) および N 極性(-c 面)の成長面が存在し、極 性により表面形状、化学的性質などが異なることから極性の制御は発光素子を作製する際に重要 である。実験的にも酸素原子により N 極性 AIN が AI 極性 AIN に極性反転することが報告されて おり、その構造モデルも提案されている [1,2]。しかしながら、極性反転における酸素原子の役割 および詳細な界面構造は未だ明らかにされていないのが現状である。これまでに我々は極性を考 慮した界面エネルギーを算出する手法を開発し、SiC/AIN および ZnO/GaN 界面の構造および極性 の評価に適用してきた[3]。本研究では、様々な界面構造(原子配列)を考慮した場合での、酸素原子 による極性反転 AIN における界面エネルギーを第一原理計算によって算出し、極性反転における 界面構造を決定する要因を検討する。

【結果および考察】Fig.は N 極性 AIN 上に酸素原子を挿入し、さらに AI 極性の AIN が形成した 場合における界面エネルギーを AI 化学ポテンシャル μ_{AI} の関数として示したものである。安達ら によって提案されている構造モデル[1]の界面エネルギーは Fig.において青線で示した 4AI+3O(AI 原子空孔が存在する界面構造)に対応している。しかしながら、この構造は準安定であり、 $\mu_{AI} \leq$ -0.5 eV の範囲では AI 原子空孔が存在し、さらに酸素原子が過剰に存在する界面構造(4AI+4O)が安 定となり、 $\mu_{AI} \geq$ -0.5 eV の範囲では AI 原子空孔が存在せず酸素原子が過剰に存在する界面構造 (6AI+4O)が安定となる。従って、MOVPE 成長に対応すると考えられる N-rich 条件においては、 4AI+4O が形成するものと考えられる。これは安定な AI-O ボンドを多く形成することに起因して おり、これまで提案されている構造モデルに比べて 4AI+4O において形成する AI-O ボンドの数が 多いことに起因している。以上の結果は、界面における AI-O ボンドの形成が極性反転に重要な役

割を果たしていることを示唆しており、 極性反転に対する知見を与えるものであ る。さらに講演ではN極性AINが形成し た場合での安定性についても議論する。

【謝辞】本研究の一部は、JSPS 科研費 (16H06415, 16H06418)、JST CREST (16815710)の援助により行われた。

【参考文献】[1] M. Adachi, M. Takasugi, M. Sugiyama, J. Iida, A. Tanaka, and H. Fukuyama, Phys. Status Solidi B **252**, 743 (2015). [2] H. Miyake, G. Nishino, S. Suzuki, K. Hiramarsu, H. Fukuyama, J. Kaur, and N. Kuwano, Appl. Phys. Express **9**, 025501 (2016). [3] T. Akiyama, H. Nakane, K. Nakamura, and T. Ito, Phys. Rev. B **94**, 115302 (2016).



Fig: Calculated interface energy σ_{int} of Al-polar AlN on Npolar AlN with O atoms as a function of Al chemical potential μ_{Al} . Atomic configurations are also shown.