

界面・表面エネルギー計算による III-V 族窒化物極性表面・界面構造状態図の作成 Surface-interface phase diagrams of III-nitrides by surface and interface energy calculations

三重大院工, ○秋山亨, 中根晴信, 内野基, 中村浩次, 伊藤智徳

Mie University, ○T. Akiyama, H. Nakane, M. Uchino, K. Nakamura, T. Ito

E-mail: akiyama@phen.mie-u.ac.jp

【はじめに】III-V族窒化物半導体のエピタキシャル成長面には極性面および非極性面があり、極性面においては成長基板および条件に依存して+c面および-c面の窒化物の作製が報告されている。[1,2]これまでに我々は、異種基板上の窒化物との界面エネルギーを定量的に計算する手法を開発し、この手法をSiC/AlN, ZnO/GaNおよびScAlMgO₄/GaN界面へと適用してその構造および極性を議論してきた。[3-5]本研究では、界面エネルギーに加えて表面エネルギーの寄与を考慮し、さらに気相での自由エネルギー(化学ポテンシャル)との比較により、温度および圧力の関数として極性表面・界面構造状態図を作成し、異種基板上の窒化物半導体薄膜の極性およびAlN基板上の極性反転についてエネルギー論の観点から議論する。

【結果および考察】表面エネルギー計算手法[6]による AlN 極性面での表面エネルギー σ_{surf} は、+c面に比べて-c面における表面エネルギーが($\sim 0.1 \text{ eV}/\text{\AA}^2$)低く、6H-SiC(0001)基板上(Si面)上におけるAl極性のAlN薄膜の形成[2]には界面の寄与を考慮することが不可欠であることが解る。実際に、SiC/AlN極性界面における界面エネルギー σ_{int} は、Al極性となる界面構造が安定となる。[3,4]Fig. は様々な表面および界面構造を考慮した場合での6H-SiC(0001)基板上(Si面)のAlN薄膜を想定し、その安定表面・界面構造を温度およびAl圧力の関数として示した状態図である。この状態図は、Alの化学ポテンシャルの関数として与えられるSiC/AlN極性界面での σ_{int} とAlN極性面での σ_{surf} との和によって得られる薄膜形成エネルギー $\sigma_{\text{film}} = \sigma_{\text{int}} + \sigma_{\text{surf}}$ と気相での化学ポテンシャル μ_{gas} [7]とを比較することによって得られるものであり、ヘテロエピタキシャル成長における基板および表面の影響を同時に考慮したものとなっている。この表面・界面構造状態図から、温度および圧力に依存して4種類の表面・界面構造をとる得ることが解る。また、これらの表面・界面構造はすべてAl極性(+c面)となっており、N極性(-c面)が安定となる領域は存在しない。この結果は、Si面SiC基板上のSiC/AlN界面においてAl極性となる界面構造が安定となる結果[3,4]と合致しており、Si面においてAl極性となるのは界面において安定なSi-Nボンドが形成されることに起因している。以上の結果は、基板上の窒化物半導体薄膜形成において、基板との界面の構造安定性が表面構造および極性を決定する要因となることを示唆している。さらに講演ではAlN(0001)基板上での極性反転に対する本手法の適用についても議論する。

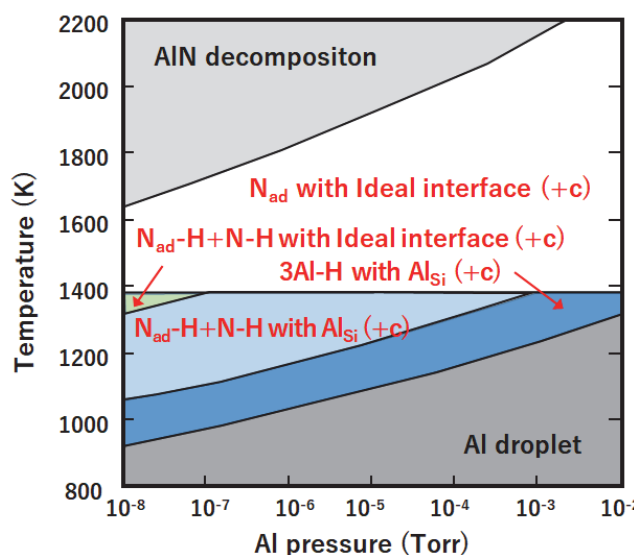


Fig. Calculated surface-interface phase diagrams of AlN on 6H-SiC(0001) substrate as functions of temperature and Al pressure obtained by comparing σ_{film} with gas-phase chemical potential μ_{gas} .

【参考文献】[1] E. S. Hellman, MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. **3**, 11 (1998) [2] F. A. Ponce *et al.*, Appl. Phys. Lett. **67**, 410 (1995). [3] T. Akiyama *et al.*, Phys. Rev. B **94**, 115302 (2016). [4] 秋山 他: 第 63 回春季応用物理学会 20p-H121-11 (2016). [5] H. Nakane *et al.*, J. Cryst. Growth, in press (2016). [6] C. E. Dreyer *et al.*, Phys. Rev. B **89**, 81305 (2014). [7] Y. Kangawa *et al.*, Surf. Sci. **493**, 178 (2001).