

界面エネルギー計算に基づく AlN(000-1)基板上の AlN および GaN の極性反転に関する理論的検討

Theoretical investigations for polarity inversion of AlN and GaN films on AlN(000-1) substrate

三重大院工, [○]内野基, 秋山亨, 中村浩次, 伊藤智徳

Mie Univ., [○]Motoshi Uchino, Toru Akiyama, Kohji Nakamura, Tomonori Ito

E-mail: 416m603@m.mie-u.ac.jp

【はじめに】 AlN 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 AlN は Al 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り、実験的には N 極性 GaN 基板に Al 原子を供給することで Ga 極性 GaN に極性が反転することが報告されている[1]。また、第一原理計算によって N 極性 AlN 基板に Al 原子層を挿入し極性が反転した AlN 層の安定性も報告されている[2]。一方我々は、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/AlN 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 N 極性 AlN(GaN)基板上的 Al(Ga) 極性および N 極性 AlN(GaN)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、極性反転における界面の寄与を界面エネルギーの観点から検討する。

【結果および考察】 Fig.は N 極性 AlN 上に Al 原子層を挿入し、さらに Al 極性および N 極性の AlN 薄膜が形成した場合における N-rich 条件下での界面エネルギーを Al 原子層の層数の関数として示したものである。この図から Al 原子層が奇数層(1 および 3 層)においては N 極性 AlN が安定となり、偶数層(2 および 4 層)においては Al 極性 AlN が安定となり極性反転が起きていることが分かる。また同様に GaN においても Al 原子層が偶数層において Ga 極性 GaN が安定となり極性反転する傾向が見られる。これは、Al-N ボンド(~5.7 eV)が Al-Al ボンド(~3.0 eV)あるいは Al-Ga ボンド(~2.6 eV)に比べ安定であり界面において Al-N ボンドを形成すること、および界面におけるエレクトロンカウンティング則を満たすことに起因するものと考えられる。これらの結果は実験および計算結果[1, 2]とも定性的に一致しており、界面における安定性により極性反転が決定されることを示唆している。

【参考文献】 [1] D. H. Lim, K. Xu, S. Arima, A. Yoshikawa, and K. Takahashi, J. Appl. Phys. **91**, 6461 (2002). [2] T. Nakayama and J. Mikami, Phys. Stat. Sol. B **242**, 1209 (2005). [3] T. Akiyama, H. Nakane, K. Nakamura, and T. Ito, Phys. Rev. B **94**, 115302 (2016).

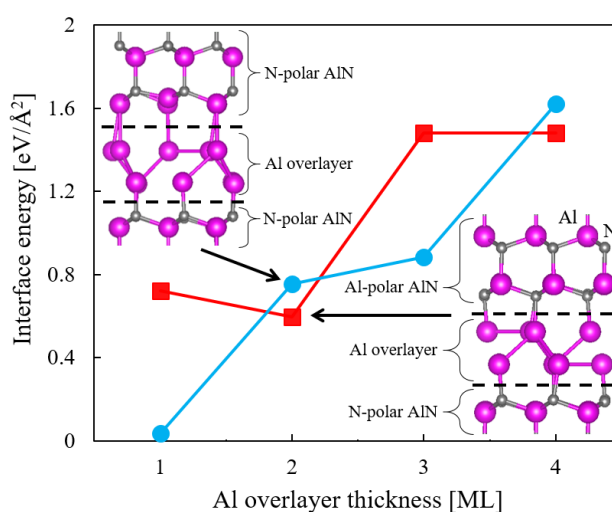


Fig: Calculated interface energy σ_{int} of AlN/(Al)_m/AlN systems under N-rich limit as a function of Al overlayer thickness, where m is the number of Al overlayer, and side view of atomic arrangements. (2 Al-vacancy at the interface) Squares and circles represent the interface energies corresponds to Al and N polarity, respectively.