

第一原理計算を用いた AlGa_xN 多形の絶縁破壊電界の推定

First-principles Estimation of Breakdown Electric Field of AlGa_xN Polymorphs

早大理工¹, 宇宙研²

張 恵^{1, 2}, 小林 大輔², 山本 知之¹, 廣瀬 和之^{1, 2}

Waseda Univ.¹, ISAS/JAXA²

°Hui Zhang^{1, 2}, Daisuke Kobayashi², Tomoyuki Yamamoto¹, Kazuyuki Hirose^{1, 2}

E-mail: kmkp-n-pguinskl@ruri.waseda.jp, hirose@isas.jaxa.jp

【はじめに】先行研究で提案された回復率というパラメータは、絶縁破壊電界(E_{bd})の実験値と良い相関があることが確認されている[1, 2]。また E_{bd} の測定値の報告がない SiC 多形に対して、この相関を用いて E_{bd} が推定されている[3]。本研究では、 E_{bd} の測定値が未報告である 4H 構造 AlN, GaN と、2H 及び 4H 構造の Al_xGa_{1-x}N ($x = 0.25, 0.5, 0.75$) 混晶について、回復率を用いた E_{bd} の推定を行った。

【計算方法】全電子 LAPW+lo 法に基づく第一原理計算パッケージ WIEN2k [4]を用いて、2H, 4H 構造の Al_xGa_{1-x}N ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) に対して、回復率を計算した。ここで、回復率は特定の原子の内殻から電子を取り除いた際の、取り除く電子数に対するその原子の価電子の変化量で定義される。本研究では、N 原子の 1s 軌道から電子を取り除き回復率を得た。また、計算には 2H 及び 4H 構造の単位胞を各軸方向に $2 \times 2 \times 2$ 及び $2 \times 2 \times 1$ 拡張したスーパーセルを用いた。また電子相関には TB-mBJ [5]ポテンシャルを用いた。

【計算結果】2H 構造の AlN, GaN の回復率と E_{bd} (15MV/cm, 5MV/cm [6]) をプロットし、その 2 点間を通る直線に、計算した各構造の AlGa_xN の回復率を代入することにより、各 AlGa_xN の E_{bd} を推定した。ここで、2 元系の E_{bd} と E_g の関係を検証し真性絶縁破壊電界 E_{bdi} を推定した研究[6]において、 $E_g < 4.0$ eV の領域で E_{bdi} は E_g の 3 乗に比例し、 4.0 eV $< E_g$ の領域で E_{bdi} は E_g に比例するとされている。その関係式に、各構造の AlGa_xN について計算で求めた E_g に対して、回復率から推定された E_{bd} をプロットすると、本研究の推定値 E_{bd} が E_{bdi} 推定式[6]に沿う傾向を示すことが確認できる(Fig. 1)。このことより、本研究において計算した回復率による E_{bd} の推定結果が、実験値から推定された E_{bdi} と E_g の相関を再現したものと考えられる。

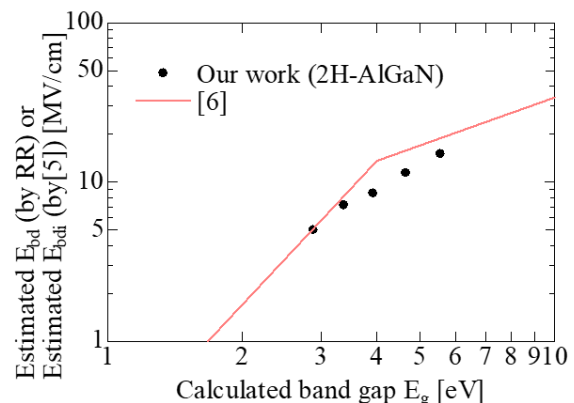


Fig 1. Relationship between calculated E_g and estimated E_{bd} of AlGa_xN

- [1] H. Seki et al., Jpn. J. Appl. Phys. 51 (2012) 04DA07.
- [2] S. Wakao et al., in IWDTF 2013, P-22.
- [3] K. Yamaguchi et al., Physica B532 (2018) 99.
- [4] P. Blaha, et al., WIEN2k, An Augmented Plane Wave+Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, Karlheinz Schwarz Technische Universität, Wien, Austria, 2001.
- [5] F. Tran et al., Phys. Rev. Lett. 102, 226401 (2009).
- [6] L. M. Wang, Proc. 25th Inter. Conf. Microelectronics, (2006) 576.