

MOVPE 成長中の極性面 AlN 表面における吸着原子の安定性解析

Adatom stability on Polar AlN Surfaces During MOVPE

九州大工¹, 九大応力研², 名大未来研³, 名城大理工⁴, 三重大地域イノベ⁵○稲富悠也¹, 寒川義裕^{1, 2, 3}, 岩谷素顕⁴, 三宅秀人⁵Kyushu Univ.¹, RIAM, Kyushu Univ.², IMASS, Nagoya Univ.³, Faculty of Science and Technology,Meijo Univ.⁴, Graduate School of Regional Innovation Studies, Mie Univ.⁵○Yuya Inatomi¹, Yoshihiro Kangawa^{1,2,3}, Motoaki Iwaya⁴, Hideto Miyake⁵

E-mail: inatomi@riam.kyushu-u.ac.jp

近年、AlN を利用した小型固体 UV 光源の開発が進められている。これらのデバイスでは主に Al 面 AlN が用いられている。一方、N 面 GaN/AlGaIn-HEMT では表面層が GaN であることによる低コンタクト抵抗や AlGaIn 層によるリーク電流の低減といったメリットがあるため、N 面 AlN の研究も進められている[1, 2]。極性面 AlN の表面再構成に関する理論研究は数多く存在するが[3, 4]、それらでは最もエネルギー的に安定な再構成表面だけを予測しており各再構成表面の相対的な安定性は評価されていない。我々は各表面構造が共存する場合の配置エントロピーの影響を考慮し、成長中の極性面 AlN 表面の各再構成構造の存在確率を解析した。この解析結果から表面吸着原子の相対的な安定性とそこから予測される成長メカニズムについて考察した。

Figure 1 に MOVPE 成長中の AlN(0001)、AlN(000-1) 表面における各再構成構造の存在確率を示す。AlN(0001) では一般的な成長温度域において N および Al の吸着原子密度はおよそ一定である。AlN(000-1) では、1300°C 以下において“N(T4) on Al ML” や “NH(T4) on Al ML” の再構成構造 (1 ML Al の上に N or NH が吸着した構造) が支配的であり高頻度で核生成が起こると予測できる。1300°C 以上では“3H(Top)”が支配的となり、Al と N の吸着原子密度が急減することによって核生成が困難になると予測できる。講演では V/III 比や水素分圧の影響についても議論を行う。

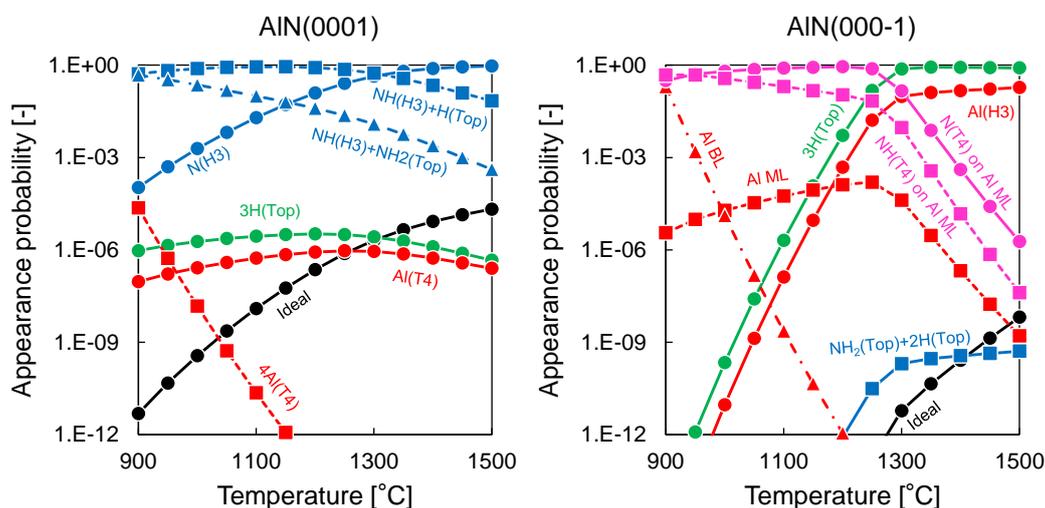


Fig. 1. Appearance probability of surface structures on AlN(0001) and (000-1) during MOVPE with $p_{\text{Al}} = 8 \times 10^{-6}$ atm, $p_{\text{NH}_3} = 2.4 \times 10^{-3}$ atm ($V/\text{III} = 300$), $p_{\text{H}_2} = 0.1$ atm.

謝辞：本研究の一部は、JST CREST (JPMJCR16N2)、KAKENHI (16H06415, JP16H06418, 19J11998)、JST SICORP (16813791B)、EC Horizon 2020 (720527) の支援により行われました。

[1] J. Lemettinen et al., J. Cryst. Growth **487**, 12 (2018). [2] S. Keller et al., Semicond. Sci. Technol. **29**, 113001 (2014). [3] J. E. Northrup et al., Phys. Rev. B **55**, 13878 (1997). [4] T. Akiyama et al., Jpn. J. Appl. Phys. **51** (2012).