

BAIN および B GaN 混晶薄膜の構造安定性および混和性に関する理論的検討

Theoretical study for structural stability and miscibility in BAIN and B GaN alloy thin films

三重大院工、^{OM1}長谷川裕也、秋山亨、アブダルムイツプラディプト、中村浩次、伊藤智徳
Mie University, ^{OM1}Y. Hasegawa, T. Akiyama, A.-M. Pradipto, K. Nakamura, and T. Ito

E-mail: 418M612@m.mie-u.ac.jp

はじめに 近年、バルク状態ではウルツ鉱(WZ)構造が安定である AlN が Ag(111)基板上にヘキサゴナル(Hex)構造で成長することが報告されている[1]。さらに、graphene/SiC(0001)界面において2層からなる二次元 GaN が作製されることも報告されており[2]、Hex BN を含む III 族窒化物の二次元原子層膜におけるナノデバイスへの応用が注目されている。一方、第一原理計算に基づき AlN および GaN は 3 配位の Hex 構造とは異なり層間に化学結合を形成する 5 配位の Hex 構造が安定となることも明らかとなっている[3]。これまでに我々は、Abell により提唱されたボンドオーダーポテンシャル(BOP)[4]を用いて、BAIN および B GaN 混晶の 3 配位 Hex 構造と WZ 構造および閃亜鉛鉱(ZB)構造との相対的安定性および混和性を明らかにしている[5]。本研究では、BOP を用いて BAIN および B GaN 混晶薄膜の 5 配位の Hex 構造と WZ 構造および ZB 構造との相対的安定性および混和性について検討する。

結果および考察 図は B 組成 0.25 での $B_xAl_{1-x}N$ および $B_xGa_{1-x}N$ 混晶薄膜における Hex 構造と WZ 構造との凝集エネルギー差を膜厚の関数として示したものである。 L_h は安定構造が Hex 構造から WZ 構造へと変化する臨界膜厚を示している。この図から、 $B_{0.25}Al_{0.75}N$ および $B_{0.25}Ga_{0.75}N$ 混晶薄膜の L_h がそれぞれ 4 および 8 層であることがわかる。また、BOP により計算された AlN および GaN 薄膜の L_h はそれぞれ 10 および 4 層であり、第一原理計算における傾向と定性的に一致している[6]。B 組成の増加に従って、 $B_xAl_{1-x}N$ 混晶薄膜の L_h は減少するのに対し、 $B_xGa_{1-x}N$ 混晶薄膜の L_h は増加する傾向があることが分かる。この $B_xAl_{1-x}N$ 混晶薄膜の結果は、5 配位 Hex 構造の面内における B-N および Al-N 結合の平衡原子間距離からの歪みが WZ 構造に比べて大きいことが原因である。一方で、 $B_xGa_{1-x}N$ 混晶薄膜においては B 組成が増加した $B_{0.75}Ga_{0.25}N$ 混晶薄膜の L_h は存在せず層数に関係なく 5 配位の Hex 構造が安定となる。これらの結果は、BOP が WZ 構造および ZB 構造などの正四面体配位の材料に加え 5 配位の Hex 構造を含む特異的な構造も再現可能であることを示唆している。講演では、BAIN および B GaN 混晶の混和性に関する議論も行う。

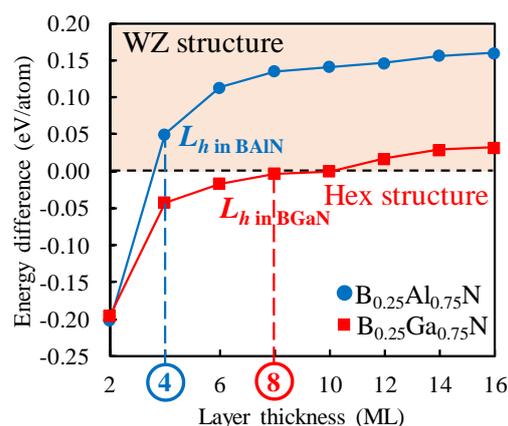


Figure. Cohesive energy differences between Hex and WZ structures for $B_{0.25}Al_{0.75}N$ (●) and $B_{0.25}Ga_{0.75}N$ (■) as a function of layer thickness. Positive values indicate that WZ structure is more stable than Hex structure.

一方、 $B_xGa_{1-x}N$ 混晶薄膜においては B 組成が増加した $B_{0.75}Ga_{0.25}N$ 混晶薄膜の L_h は存在せず層数に関係なく 5 配位の Hex 構造が安定となる。これらの結果は、BOP が WZ 構造および ZB 構造などの正四面体配位の材料に加え 5 配位の Hex 構造を含む特異的な構造も再現可能であることを示唆している。講演では、BAIN および B GaN 混晶の混和性に関する議論も行う。

参考文献 [1] P. Tsipas *et al.*, Appl. Phys. Lett. **103**, 251605 (2013). [2] Z. Y. A. Balushi *et al.*, Nature Mater. **15**, 1166 (2016). [3] Y. Tsuboi *et al.*, Physica Status Solidi B **255**, 1700446 (2018). [4] G. C. Abell, Phys. Rev. B **31**, 6148 (1985). [5] Y. Hasegawa *et al.*, J. Appl. Phys. **58**, SCCB21 (2019). [6] T. Akiyama *et al.*, J. Cryst. Growth **511**, 89 (2019).