20a-D3-1

GaAs(001)-(2x4)表面における N ペア形成に関する理論検討

Theoretical investigations for N-pair formation on the GaAs(001)-(2×4) surfaces

三重大院工 [1]　○伊藤 智徳 [1]，杉谷龍彦 [1]，秋山 亨 [1]，中村 浩次 [1]

Mie Univ. [1], °Tomonori Ito[1], Tatsuhiko Sugitani[1], Toru Akiyama[1], Kohji Nakamura[1]

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

1. はじめに　GaAs(001)表面に N をδドーピングすることで, N ペアを形成することが実験的に示されている[1]が，その形成機構については不明である。本研究では，GaAs(001)-(2×4)表面を対象に，量子論的アプローチにより N 取り込み過程を検討し, N ペア形成機構を明らかにする。

2. 計算方法　計算方法としては非経験的技ポテンシャル法ならびに気相の化学ポテンシャルを考慮した量子論的アプローチを用いる。さらにモンテカルロ法を併用することで, N ペア形成機構を成長条件（温度ならびに分子線圧力）の関数として検討する。

3. 計算結果及び考察　図 1 は成長条件（温度 T=830 K，　As_4 圧力 p_{As4}=3.0×10^{-6} Torr，N 圧力 p_N=7.0×10^{-6} Torr）における GaAs(001)-(2×4)α2 表面での N 取り込みとその結果出現する N ペア形成の過程を示したものである。N-As ダイマーの吸着，N-As 原子の置換，As ダイマーの脱離という一連の過程が, 最終的に第 3 層において[110]方向に配列した N ペア形成をもたらすことがわかる。ここで第 3 層における N ペアの安定化は，結合の強い Ga-N ボンド数の増加によるエネルギー利得に起因している。また，この N ペアを含む(2×4)α2 表面の出現割合は，温度にのみ強く依存し，830 K で 61%であり，残る 39%は 2 個の N は含むものの [110]方向に配列しない構造であることがわかった。図 2 に [110]方向に配列した N ペアを含む(2×4)表面構造の出現割合を温度 T の関数として示す。温度範囲 600～750 K において安定な N ペアを含む(2×4) α1 表面の出現割合は 94%と大きく，N ペアが効率的に形成されていることがわかる。これは(2×4) α1 表面における N ペア周辺のひずみが, (2×4)α2 表面におけるひずみに比べて顕著に小さいことに起因していると考えられる。

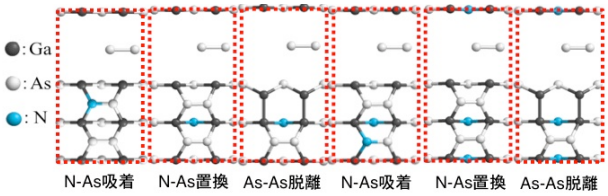

図 1：[110]方向に配列した N ペアの形成過程。

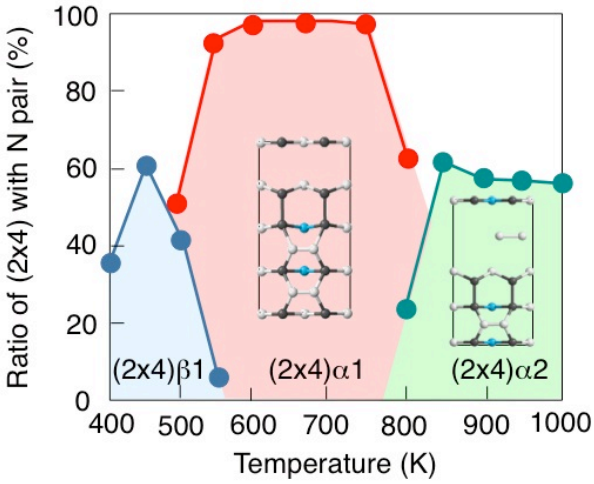

図 2：N ペアの出現確率の温度依存性。

参考文献

[1] T. Kita and O. Wada: Phys. Rev. B **74** (2006) 035213.

© 2013 年　応用物理学会