

第一原理計算による GaN(0001) 表面への Ga₂O の吸着に関する研究

First-Principles Calculation of Adsorption of Ga₂O on GaN(0001) Surface

○河村 貴宏^{1, 2}、北本 啓²、今出 完²、吉村 政志²、森 勇介²、森川 良忠²

(1. 三重大院工、2. 阪大院工)

○Takahiro Kawamura^{1,2}, Akira Kitamoto², Mamoru Imade², Masashi Yoshimura²,

Yusuke Mori², Yoshitada Morikawa² (1.Mie Univ., 2.Osaka Univ.)

E-mail: tkawamura@mach.mie-u.ac.jp

はじめに Ga₂O を Ga ソースとして用いる GaN の気相成長 (OVPE) 法は、排気口を詰まらせる固体副生成物が無く連続成長が可能である事から [1], バルク GaN 成長法として期待されている。その実用化に向けて結晶品質や成長速度などを向上させるためには成長過程を十分に理解する必要がある。そこで本研究では第一原理計算を用いて Ga₂O 分子が GaN(0001) 表面へ吸着する過程のシミュレーションを行った。また GaN(0001) 面上の Ga₂O 吸着サイトについても検討した。

計算方法 計算には第一原理分子動力学プログラム “STATE-Senri” [2] を用いた。GaN(0001) の理想表面に対して Ga₂O が遠方から結晶表面に吸着するまでの自由エネルギー変化を調べた。次に GaN(0001) 面上の Ga₂O の吸着位置と自由エネルギーの関係を表したポテンシャルエネルギー曲面を作成し、Ga₂O の吸着サイトについて検討した。なお、初期条件として Ga₂O は Ga-O 結合が a 軸と平行になるように配置した。また O 原子の位置を Ga₂O の位置と定義した。

結果および考察 図 1 は GaN(0001) 表面から Ga₂O までの高さでエネルギー変化量を示している。参考に NH₃ と H₂O の結果も示している。この結果から、Ga₂O が結晶表面に到達するまでにエネルギー障壁が無いことが分かる。したがって、結晶成長に関して言えば、吸着した後の過程が重要であると考えられる。次に図 2 に示すポテンシャルエネルギー曲面の結果から、Ga₂O は Ga 原子上に吸着した状態が安定であり、N 原子や六角形の中心の上は不安定である事が分かった。ただしこれらは理想表面上での結果であるため、実際のエネルギー障壁とは異なると思われる。より正確には結晶表面の状態 (N や NH₂ で覆われてるなど) を含めた検討が必要である。

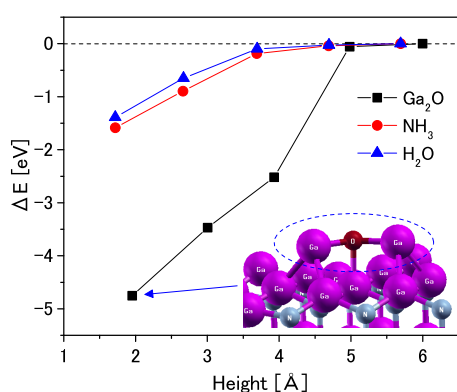


図 1: Potential energy surface as a function of height of the molecule from the GaN surface (average position of the topmost Ga atoms).

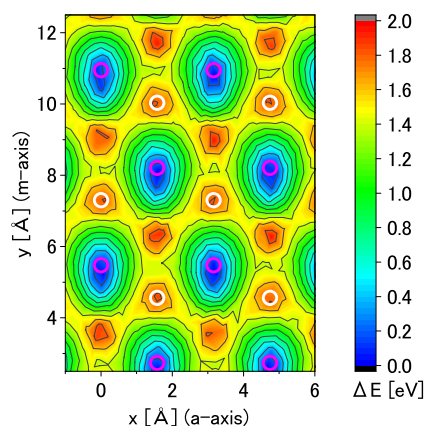


図 2: Potential energy surface for Ga₂O adsorption on GaN(0001) surface. Purple and white circles indicate the positions of Ga and N atoms.

[1] M. Imade et al., J. Cryst. Growth **312** (2010) 676.

[2] Y. Morikawa, Phys. Rev. B **51** (1995) 14802.