

GaN 表面 CARE 加工の反応メカニズムの第一原理計算による解析 -ステップ/キンク部における水分子の解離吸着-

Analysis of reaction mechanism in Catalyst-referred etching of GaN surface

-Dissociative adsorption of water molecule at step/kink site-

○稲垣 耕司、森川 良忠、山内 和人 (阪大工)

○Kouji Inagaki, Yoshitada Morikawa, Kazuto Yamuchi (Osaka Univ.)

E-mail: inagaki@prec.eng.osaka-u.ac.jp

CARE (CATalyst-Referred Etching) は触媒と加工対象表面を加工液中で接触させ、接触点でのみ加工液を活性化させてエッチングさせることにより平坦化を狙った加工法である。GaN の場合は Pt 触媒と水エッチング液が用いられる。本研究は第一原理計算により加工メカニズムを解明し、加工技術の改善に資することを目的とする。GaN 加工後の表面はステップテラス構造を持つことが明らかになっており、表面原子の除去はステップ端もしくはステップのうちキンクを形成している部分で主に生じていると考えられる。GaN 表面のステップ端での解析[1]に引き続き、本発表ではキンクサイトに水分子が解離吸着する過程を解析し、その反応経路と障壁を解析した結果やステップ端での反応との比較、さらに Pt 触媒の役割について解析した結果を報告する。図1はキンク部の Ga 原子の下層との結合3つのうち、ステップの奥側の N 原子との結合を切って解離吸着する過程を解析した例である。この反応では障壁は 1.4 eV であった。

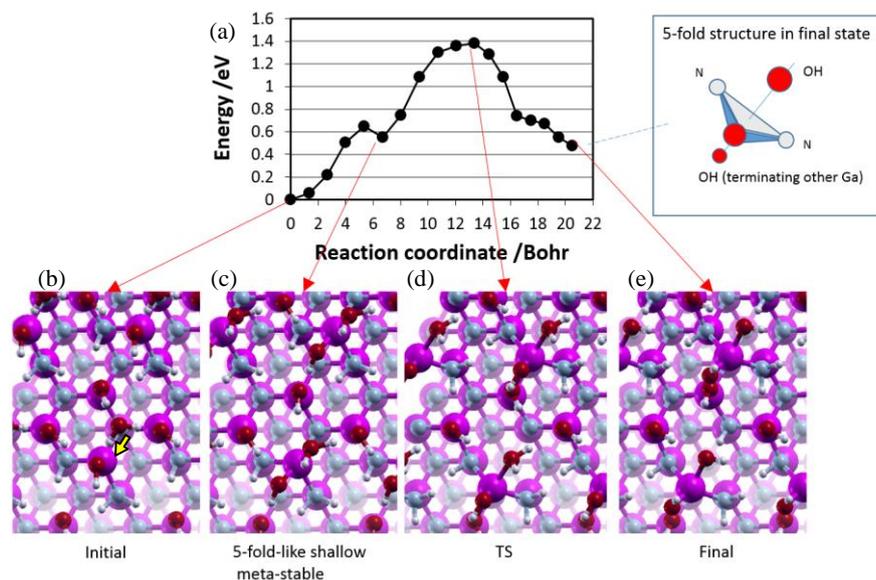


図1 GaN(111)キンクサイトでの水分子の解離吸着過程の解析

(a) 反応活性化エネルギー、(b)–(e) GaN(111)キンク表面上面図反応経路 (テラス面の法線方向から見た図)。紫大球、灰中球、赤中球、白小球はそれぞれ Ga、N、O、H の原子を表す。(b)中の黄色矢印は水分子が Ga 原子に作用する方向を表す。(c)や(e)の構造は 5 配位構造をとることにより若干安定化している。

[1] M. Oue, et al., Nanoscale Res. Lett. 8 232 (2013).