

AlN(11 $\bar{2}$ 2)面における表面構造および成長初期過程に関する量子論的アプローチ *Ab initio*-based approach for surface structure and initial growth process on AlN(11 $\bar{2}$ 2) surface

三重大院工, °竹本圭孝, 秋山亨, 中村浩次, 伊藤智徳

Mie Univ., °Takemoto Yoshitaka, Toru Akiyama, Kohji Nakamura, Tomonori Ito

E-mail: 413m613@m.mie-u.ac.jp

【はじめに】深紫外発光デバイスとして応用が期待されている AlN において, c 軸方向に沿った内部電界の影響を抑えるために, 無極性面や半極性面での結晶成長に関する研究が盛んに行われている[1, 2]. 特に近年, 半極性面である AlN(11 $\bar{2}$ 2)面で成長が MOVPE 成長条件(H_2 圧力)に依存することが報告されている[2]. 一方, 理論的に MBE 成長条件下における AlN(11 $\bar{2}$ 2)面の表面構造が提案されている[3]ものの, MOVPE 成長条件を考慮した AlN(11 $\bar{2}$ 2)面の表面再構成および成長過程については明らかになっていない. これまでに我々は, 様々な面方位での MOVPE 成長条件を考慮した AlN 表面構造を明らかにし, そこでの成長初期過程を明らかにしてきた[4, 5]. 本研究では, 第一原理計算を用いて温度および圧力を考慮した半極性 AlN(11 $\bar{2}$ 2)面の表面再構成および成長初期過程について検討する.

【計算方法】表面構造の候補として, 1×1 , $c(2\times 2)$, および 2×2 表面周期を仮定する. 各原子の吸着エネルギーを第一原理計算によって算出し, 吸着エネルギーと温度および圧力を考慮した気相中の化学ポテンシャル[6]を比較することにより表面構造状態図を作成する.

【結果および考察】Fig. は温度 T と H_2 圧力の関数として示した AlN(11 $\bar{2}$ 2)面における表面構造状態図である. この図より, 実験温度下において, 低 H_2 圧力条件では理想表面に Al が吸着した $c(2\times 2)Al_{ad}$ が安定となる. 一方, 高 H_2 圧力条件では, 理想表面に Al, N, および H が吸着した $c(2\times 2)N_{ad}-H+Al_{ad}-H+3Al-H$ が安定表面として出現する. この結果は, AlN(0001) 面の場合と同様の傾向を示しており, AlN(11 $\bar{2}$ 2)面における水素の吸着エネルギー (-1.1 eV/atom) が AlN(0001) 面 (-1.2 eV/atom)[4]と近い値をもつことに起因すると考えられる. 以上の結果は, 表面構造が H_2 圧力に依存しない無極性 AlN(11 $\bar{2}$ 0)面[5]や半極性 AlN(11 $\bar{1}$ 02)面および AlN(11 $\bar{1}$ 01)面[7]と大きく異なり, AlN(11 $\bar{2}$ 2)面における表面構造が H_2 圧力に依存して変化し得ることを示唆している.

【参考文献】 [1] S. Ichikawa *et al.*: Appl. Phys. Lett. **104** (2014) 252102. [2] J. Stellmach *et al.*: J. Cryst. Growth **355** (2012) 59. [3] E. Kalesaki *et al.*: J. Appl. Phys. **112** (2012) 033510. [4] T. Akiyama *et al.*: Appl. Phys. Lett. **100** (2012) 251601. [5] T. Akiyama *et al.*: Jpn. J. Appl. Phys. **51** (2012) 048002. [6] Y. Kangawa *et al.*: Surf. Sci. **507** (2002) 285. [7] Y. Takemoto *et al.*: submitted.

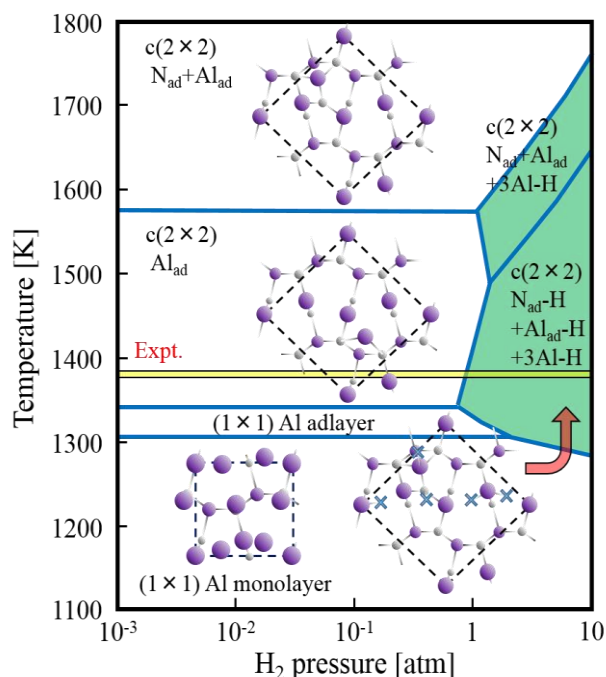


Fig.: Calculated surface phase diagram of AlN(11 $\bar{2}$ 2) surface as functions of temperature and H_2 pressure at Al pressure of 1.32×10^{-6} atm (1×10^{-3} Torr). The hydrogen incorporated surfaces are stabilized in the regions emphasized by shaded areas. Top views of surface structures are also shown. Large and small circles, and crosses represent Al, N, and H atoms, respectively. The growth temperature range in Ref. 2 is shown by yellow line.