

第一原理計算による OVPE 成長条件下における GaN(000 $\bar{1}$) 表面構造の解析

First-Principles Study of GaN(000 $\bar{1}$) Surfaces under the OVPE Growth Conditions

○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、
寒川 義裕³、柿本 浩一³ (1. 三重大院工、2. 阪大院工、3. 九大応力研)

○Takahiro Kawamura^{1,2}, Akira Kitamoto², Mamoru Imade², Masashi Yoshimura²,
Yusuke Mori², Yoshitada Morikawa², Yoshihiro Kangawa³, Koichi Kakimoto³

(1. Mie Univ., 2. Osaka Univ., 3. RIAM, Kyushu Univ.)

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

はじめに Oxide vapor phase epitaxy (OVPE) 法による GaN 成長 [1] では原料に O 原子種を含むため O 不純物量の制御が課題となっている。不純物の取り込みや結晶成長過程の詳細な検討には成長条件下における結晶表面構造に関する知見が必要である。そこで本研究では第一原理計算を用いて OVPE 成長条件下での GaN(000 $\bar{1}$) 表面構造について検討を行った。

計算方法 第一原理分子動力学プログラム“STATE-Senri”[2]を用いて、GaN(000 $\bar{1}$) 面上に Ga, N, H, O で構成される原子、分子を吸着させた表面構造モデルの解析を行った。表面構造の安定性を評価するため、表面生成エネルギー $E_f = E_{tot} - E_{ref} - n_{Ga}\mu_{Ga} - n_N\mu_{NH_3} - (\frac{1}{2}n_H - \frac{3}{2}n_N)\mu_{H_2} - n_O\mu_O$ を計算した [3]。 E_{tot} と E_{ref} はそれぞれ表面構造モデルと基準表面構造の全エネルギーである。 $n_{(Ga,N,H,O)}$ は各吸着原子数、 $\mu_{(Ga,NH_3,H_2,O)}$ は温度・圧力の影響を考慮した各原子・分子のケミカルポテンシャルである。各表面構造モデルの表面生成エネルギーを比較することで表面状態図を作成した。

結果および考察 図 1 と 2 はそれぞれ O 原子種を考慮しない場合とした場合の GaN(000 $\bar{1}$) 表面状態図の温度・Ga 圧力依存性を示している。NH₃ 圧力と H₂ 圧力はともに 0.1atm、O 圧力は Ga 圧力の半分とした。OVPE 成長条件を温度 1500K、Ga 圧力 10⁻²–10⁻³atm と仮定すると、O が無い場合は H や Ga monolayer で覆われている構造 (図中の“3H”と“Ga monolayer”の領域) が安定であるが、O がある場合には Ga monolayer に O が取り込まれている構造 (図 3 参照) が安定であることが分かった。Ga monolayer には O が非常に取り込まれやすいので、O 不純物量を減少させるには成長温度を上げる、または H₂ 圧力を増加させて“3H”表面構造が安定な領域を増やすことで、結晶表面が H で覆われている条件下で結晶成長させることが有効であると考えられる。

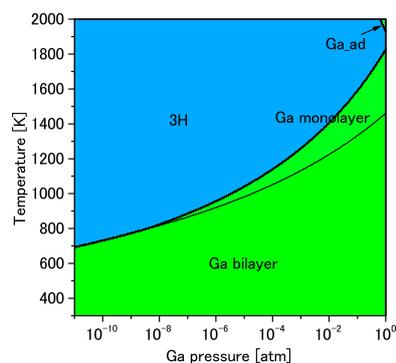


図 1: Surface phase diagram on GaN(000 $\bar{1}$) without O atomic species.

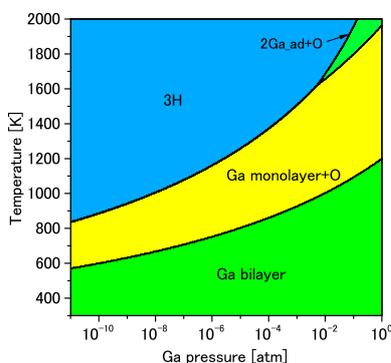


図 2: Surface phase diagram on GaN(000 $\bar{1}$) with O atomic species.

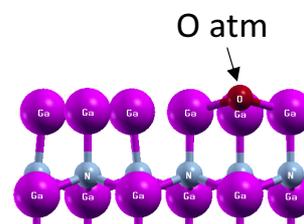


図 3: Simulation model of a “Ga monolayer+O” surface.

- [1] M. Imade et al., J. Cryst. Growth **312**, 676 (2010). [2] Y. Morikawa, Phys. Rev. B **51**, 14802 (1995).
[3] A. Kusaba et al., Jpn. J. Appl. Phys. **55**, 05FM01 (2016).