

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II -表面キंकサイト周辺の H₂O 終端構造-

Analysis of reaction mechanism in Catalyst-referred etching of GaN surface
- Atomic structure of H₂O surface termination around GaN surface kink -

○稲垣耕司、Pho Van Bui、磯橋 藍、藤 大雪、森川良忠、山内和人(阪大院工)

○Kouji Inagaki, Pho Van Bui, Ai Ishohashi, Daisetsu Toh,

Yoshitada Morikawa, Kazuto Yamuchi (OsakaUniv.)

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

本研究は第一原理計算により GaN 表面の CARE (CAlyst-Referred Etching) 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。加工は本質的には GaN 表面での H₂O 分子の解離吸着反応と予想している。GaN はIII-V族半導体であることから、IV属の表面とは違う特異な表面状態である。すなわち Ga 表面が OH 終端されると電荷的に不安定であるため、四つに一つは H が付加して H₂O として終端されている[1]。この H が隣接した OH に移動することは容易で、これによって表面反応過程での自由度が増え、解離吸着などの反応の障壁が下がる可能性がある。これまでの計算から、GaN 表面ステップへの H₂O 分子解離吸着反応について活性化障壁を下げる効果があることが明らかとなっている。CARE 加工後の表面でステップテラス構造が出現することからキंक部分で優先的にエッチングが進むことが予想されるため、本研究ではキंक構造を取り扱う。図のような表面 H₂O 終端を含むキंक表面構造を作成した。図中1~7のサイトのどこにでも H が吸着し、0.1eV 程度のエネルギー差しかない準安定構造が得られることが分かった。2のサイトのみ水素結合ができないため若干エネルギーが高くなる。今後、この表面について水の解離吸着過程を調べる予定である。

本研究は JSPS 科研費基盤研究(C)15K06505 の助成を受けたものである。また計算は東京大学物性研のスパコンの助成を受けて実施された。

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

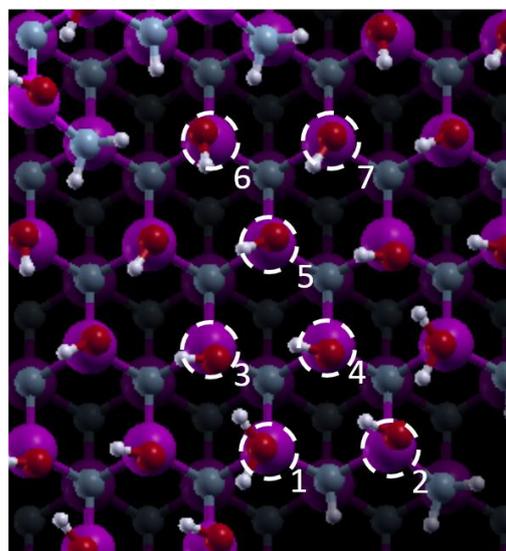


図 用いた GaN 表面モデル 3C 構造のキंकのある GaN(111)表面で Ga を OH、N を H で終端している。1~7の表面 OH 終端のいずれかに H が付加し安定化する。この図では1のサイトに H が存在する。