

OVPE 成長条件下における GaN 非極性表面構造の第一原理計算

First-Principles Study of Non-Polar GaN 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 原料に O 原子種を含む Oxide Vapor Phase Epitaxy (OVPE) 法 [1] による GaN 成長では O 不純物量の制御が課題となっており、結晶品質および結晶成長速度の改善のため O 原子種を考慮した GaN 成長プロセスの解明が求められている。本研究ではその一環として第一原理計算を用いて OVPE 成長条件下における GaN 非極性表面構造について検討を行った。

計算方法 本研究では第一原理分子動力学プログラム“STATE-Senri”[2] を用いて、GaN(11 $\bar{2}$ 0) 面と (1 $\bar{1}$ 00) 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について解析を行い、その結果をもとに表面生成エネルギー $E_f = E_{tot} - E_{ref} - n_{Ga}\mu_{Ga} - n_N\mu_{NH_3} - \left(\frac{1}{2}n_H - \frac{3}{2}n_N\right)\mu_{H_2} - n_O\mu_O$ を計算した。 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、また $n_{(Ga,N,H,O)}$ と $\mu_{(Ga,NH_3,H_2,O)}$ はそれぞれ各吸着原子・分子数と温度・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 [3]。各表面構造モデルの表面生成エネルギーを比較し、温度・Ga 圧力と安定な表面構造の関係を表面状態図にまとめた。

結果および考察 図 1(a) と 1(b) にそれぞれ O 原子種を考慮しない場合と考慮した場合の GaN(11 $\bar{2}$ 0) 面の表面状態図を示す。ここで、NH₃ 圧力と H₂ 圧力はともに 0.1 atm、O 圧力は Ga 圧力の半分とした。OVPE 成長条件を温度 1500 K、Ga 圧力 10⁻²–10⁻³ atm と仮定すると、O が無い場合は理想表面（図中の“ideal surface”の領域）が表れており、O がある場合には理想表面の Ga に OH が、また N に H が吸着している構造（“Ga₄OH+N₄H”）が安定であることが分かった。OH の脱離には約 5.2 eV のエネルギーが必要であるため成長条件下ではその脱離は起こりにくいと考えられる。一方、結晶表面で OH+H→H₂O の反応が起こり、その後 H₂O の形で脱離する場合を考えると必要なエネルギーはそれぞれ約 1.8 eV と 0.38 eV と見積もられたので、その脱離反応は容易に起こると考えられる。

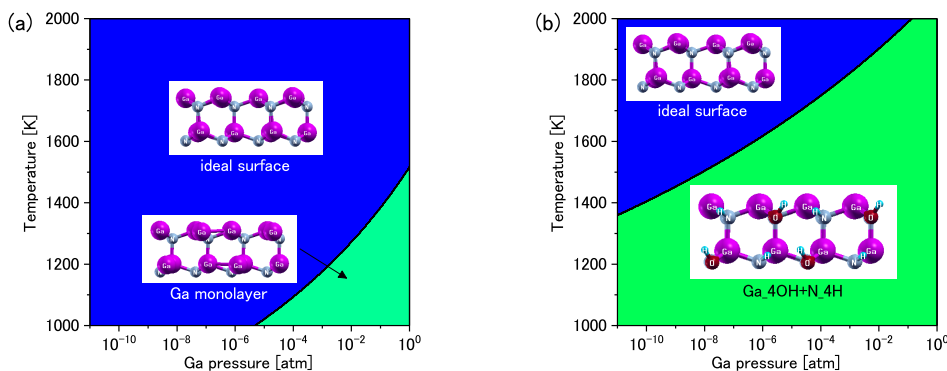


図 1: Surface phase diagram of GaN(11 $\bar{2}$ 0) surface (a) without and (b) with O atomic species.

[1] Y. Yamaguchi et al., Jpn. J. Appl. Phys. **55**, 05FB04 (2016). [2] Y. Morikawa, Phys. Rev. B **51**, 14802 (1995). [3] Y. Kangawa et al., Surf. Sci. **493**, 178 (2001).