

計算科学で見る GaN エピタキシャル成長

Computational Materials Science for GaN epitaxial Growth

三重大院工¹, ○伊藤 智徳¹Mie Univ.¹, Tomonori Ito¹

E-mail: tom@phen.mie-u.ac.jp

1. はじめに エピタキシャル成長においては、成長の「場」としての表面，そこでの吸着，脱離という一連の過程を考えることが重要である。本講演では計算科学の立場から，GaN エピタキシャル成長を中心に，成長機構の理解に向けたアプローチを紹介する。

2. 計算方法 計算方法としては非経験的擬ポテンシャル，量子論的アプローチを用いて，結晶成長条件（温度，圧力）の関数としての GaN 表面構造安定性，吸着を含む成長過程を検討する。

3. 計算結果及び考察 図 1(a) および 1(b) に水素吸着した，GaN 極性(0001)，半極性(11-22) 表面構造状態図の計算結果を示す。極性(0001)表面においては，低温相として N 吸着原子が H と結合，Ga 原子が H と結合した状態が混在する相 ($\text{N}_{\text{ad}}\text{-H}+\text{Ga-H}$) が，昇温に伴い Ga が脱離することで，Ga 原子が H と結合した状態に代わって NH_2 が混在する相 ($\text{N}_{\text{ad}}\text{-H}+\text{NH}_2$) が出現する。複数の安定相の出現は，無極性 (11-20) 表面においても得られた。一方，半極性(11-22)表面においては，Ga は脱離せず， $\text{N-H}+\text{Ga-NH}+\text{Ga-NH}_2$ の状態が広い成長条件で安定となることがわかる。これら表面構造における Ga 吸着を検討することで，成長過程の一端を垣間見ることができる。図 1(c) は Ga 吸着エネルギーの温度依存性を示したものである。表面構造状態図を反映して，Ga の吸着エネルギーは，極性(0001)面と無極性(11-20) 面では温度に依存するが，半極性 (11-22) においては変化しない。この結果から，低温 (1300 K) では {11-22} 成長が遅いこと，高温 (1400 K) では {0001} および {11-20} 成長が {11-22} 成長よりも抑制されることが示唆される。以上の結果は，無極(11-20) 表面における MOVPE 選択成長でのファセット形成の実験結果（低温で {11-22} 面，高温で {0001} および {11-20} 面を形成）と定性的に一致している。

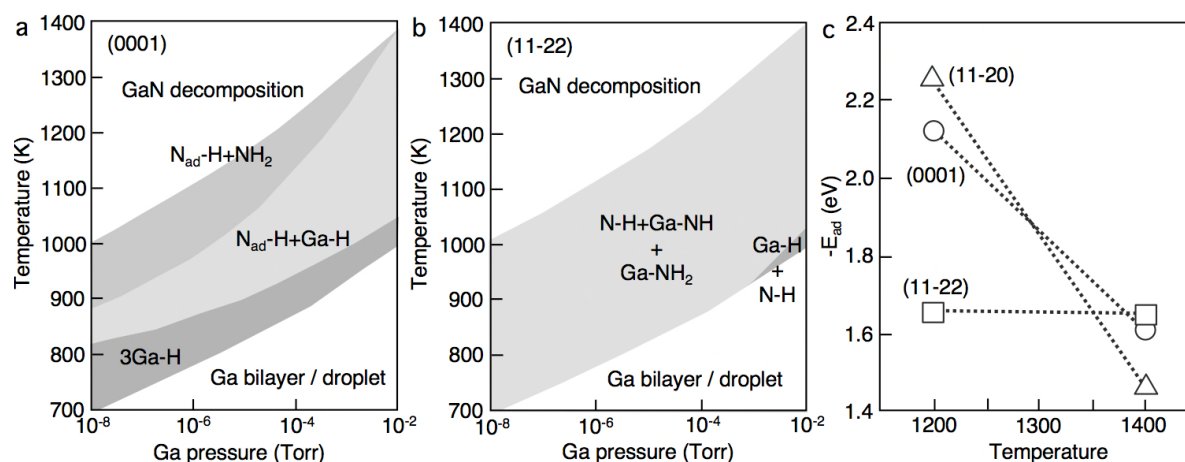


図 1. (a) (0001), (b) (11-20) 表面構造状態図, (c) Ga 吸着エネルギーの計算結果。