

GaN(0001)表面におけるステップ端での吸着・脱離の挙動に関する理論的検討 Ab initio study for adsorption-desorption behavior at step edges of GaN(0001) surface

三重大院工, ○秋山亨, 相可拓巳, 中村浩次, 伊藤智徳

Mie University, ○Toru Akiyama, Takumi Ohka, Kohji Nakamura, Tomonori Ito

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

【はじめに】III族窒化物のエピタキシャル成長では、ステップフロー成長において平坦な成長層が得られ窒素リッチ条件において六角形状のヒロックが形成することが知られている。分子線エピタキシャル成長(MBE)において、これら成長層のモルフォロジーは転位等の欠陥ではなく表面での動力学的な効果によって引き起こされると考えられている。特に、Ehrlich-Schwobel(ES)障壁[1]と呼ばれる表面でのステップ端上下での吸着原子の取り込みの非対称性およびその成長条件依存性がこれらモルフォロジーを決定する上で重要であることが指摘されている。[2,3]一方、我々はこれまでにステップフロー成長機構の解明を目的として、GaN(0001)表面におけるステップ端の原子レベルでの構造安定性を第一原理計算に基づき検討し、成長条件に依存して異なる構造の表面およびステップ端が出現し得ることを見出している。[4]本研究では、ステップ端を含むGaN(0001)表面におけるGaおよびN原子の吸着・脱離およびマイグレーションの挙動を明らかにし、ES障壁とステップフロー成長との関係性を検討する。

【結果および考察】Fig. 1はMBE成長を想定した場合でのGa(0001)表面における[1-100]方向のステップ端およびテラス領域でのGaおよびN原子の吸着・脱離の挙動(吸着エネルギー)を示した模式図である。ここで、テラス領域での吸着エネルギーは平坦な表面(2×2再構成表面)における計算結果を記している。Fig. 1(a)はGa adlayerが存在しない状況(Ga adatom表面[5])での吸着・脱離を示しており、テラス領域でN原子が容易に吸着することが解る。また、Ga原子で吸着エネルギーが低くなりステップ端で取り込まれ易くなる

に対し、N原子はステップ端で吸着エネルギーが高くなり、N原子ではステップ端でのエネルギー障壁の存在すること考えられる。一方、Fig. 1(b)に示すGa adlayerが存在する表面においては、GaおよびN原子ともにテラス領域に比べてステップ端での吸着エネルギーが高くなっている。また、Fig. 1(a)と1(b)との比較により、表面構造に依存して吸着エネルギーが変化することも解り、Ga adlayerの存在によりGa原子は吸着しにくくなるのに対して、N原子は吸着しやすくなる。これは、N原子においてGa adlayerとGa-N bond形成するためである。講演ではステップバンチングの要因となるES障壁についても議論する。

【参考文献】[1] R. L. Schwoebel and E. J. Shipsey, J. Appl. Phys. **37**, 3682 (1966). [2] H. Zheng, M. H. Xie, H. S. Wu, and Q. K. Xue, Phys. Rev. B **77**, 045303 (2008). [3] N. A. K. Kaufmann, L. Lahourcade, B. Hourahine, D. Martin, N. Grandjean, J. Cryst. Growth **433**, 36 (2016). [4] 相可 他, 第79回秋季応用物理学会 19p-PA4-9 (2018). [5] J. E. Northrup, J. Neugebauer, R. M. Feenstra, and A. R. Smith, Phys. Rev. B **61**, 9932 (2000).

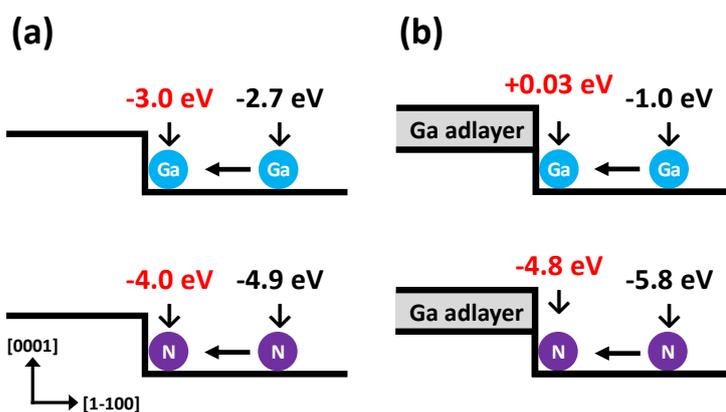


Fig. 1 Schematics of adsorption-desorption behavior of Ga and N atoms close to step edges of GaN(0001) surfaces with (a) Ga adatoms and (b) Ga adlayer along the [1-100] direction. The adsorption energies of Ga and N atoms at step edges and terraces are shown.