

キンクおよびステップ構造を持つ GaN 極性表面における O 不純物の脱離エネルギーの解析

Desorption energies of O impurities from polar GaN surfaces with kink and step structures

三重大院工¹, 阪大院工², 九大応力研³ ○ 河村 貴宏^{1,2}, 竹田 浩基¹, 北本 啓²,
今西 正幸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
Mie Univ.¹, Osaka Univ.², RIAM, Kyushu Univ.³ ○ Takahiro Kawamura^{1,2}, Hiroki Takeda¹,
Akira Kitamoto², Masayuki Imanishi², Masashi Yoshimura², Yusuke Mori²,
Yoshitada Morikawa², Yoshihiro Kangawa³, Koichi Kakimoto³
E-mail: tkawamura@mach.mie-u.ac.jp

はじめに GaN の気相成長法の 1 つである Oxide Vapor Phase Epitaxy (OVPE) 法では Ga 原料に Ga₂O を用いるため O 不純物濃度が高くなりやすく、その制御が課題となっている。我々はこれまでに第一原理計算を用いて、OVPE 成長条件下において比較的平坦な GaN 結晶表面への O 不純物の吸着と脱離について解析を行ってきた [1]。本研究ではキンクおよびステップ構造を持つ GaN 極性表面への O 不純物の吸着とその脱離エネルギーについて解析を行ったので、その結果を発表する。

計算方法 第一原理分子動力学プログラム “STATE-Senri” [2] を用いて解析を行った。図 1 に示すキンクとステップ構造を持つ GaN 極性面上に O 不純物 (O または OH) を吸着させた計算モデルを用いてエネルギー的に安定な表面構造を調べた。その結果をもとに O 不純物が吸着した表面構造と基準表面構造とのエネルギー差から O 不純物の脱離エネルギーを評価した。この際にエネルギー障壁は無いものと仮定した。

結果および考察 図 2 に GaN(0001) 面と (000 $\bar{1}$) 面上に吸着させた O および OH の脱離エネルギーと、一次の反応速度式 (頻度因子 $1 \times 10^{13} \text{ sec}^{-1}$, 温度 1500 K) により求めた脱離頻度をまとめた結果を示す。棒グラフ (左縦軸) は脱離エネルギー、散布図 (右縦軸) は脱離頻度を表しており、この結果は極性面では (0001) 面上に吸着した O 原子の脱離エネルギーが大きく脱離し難いことを示している。一方で、GaN の気相成長では一般的に (0001) 面よりも (000 $\bar{1}$) 面の方が O 不純物濃度が高いことが知られている [3]。O 原子は N サイトに取り込まれやすいのだが、今回の解析では結晶表面の N 欠陥を考慮していないため上記のような実験結果との違いが生じたと考えられる。

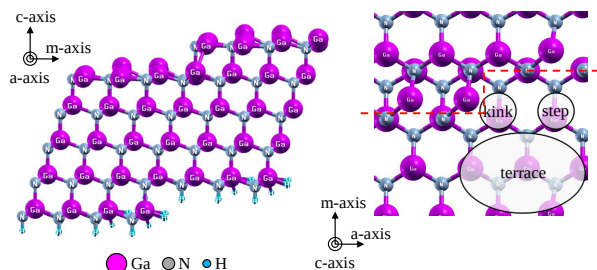


図 1: GaN(0001) の基準表面構造

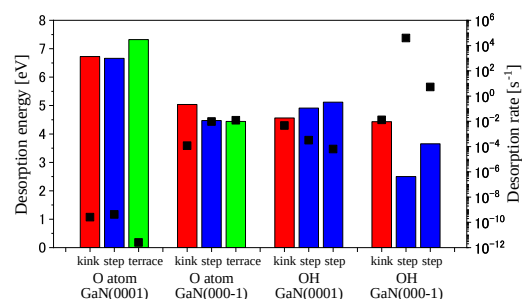


図 2: O 不純物の脱離エネルギーと脱離頻度

[1] T. Kawamura et al., Jpn. J. Appl. Phys. **57**, 115504 (2018).

[2] Y. Morikawa, Phys. Rev. B **51**, 14802 (1995).

[3] N. A. Fichtenbaum et al., **310**, 1124 (2008).