有機金属気相エピタキシ一成長における GaN 複合ファセット上での吸着 Ga 原子の振る舞い

Ga adatom behavior on GaN nonplanar facets during metalorganic vapor phase epitaxy 三重大院工, ○瀬田雄基, 秋山亨, プラディプトアブダルムィッツ, 中村浩次, 伊藤智徳 Mie University, ○Yuki Seta, Toru Akiyama, Abdul-Muizz Pradipto, Kohji Nakamura, Tomonori Ito E-mail: 418M608@m.mie-u.ac.jp

【はじめに】GaN のエピタキシャル成長では半極性面を含む様々な面方位におけるファセットが成長条件に依存して出現することが知られている。特に有機金属気相エピタキシー(MOVPE)による選択成長(SAG)では MOVPE 条件によって GaN ナノ構造の形状が大きく変化することが報告されている[1,2]。 H_2 キャリアガス条件下における GaN ナノ構造は温度上昇に伴い[0001]方向に沿った高さが増加するのに対して、キャリアガス中の N_2 の割合が増えると、温度上昇に伴い無極性方向に沿った直径が増加することが報告されている[3,4]。これらの成長条件依存性を理論的に理解するために、我々は極性面および半極性面の表面エネルギーを用いて Wulff の作図を行い、平衡結晶形状の評価を行った[5]。しかし、得られた平衡形状は実験結果と定性的に一致するものの、成長のカイネティクスが考慮されていない。 本研究では複合ファセット上の吸着 Ga 原子の挙動を解析し、Ga 原子の挙動に及ぼす影響について検討し、成長条件に依存する結晶形状のモルフォロジー変化のメカニズムについて議論する。

【結果および考察】Fig. 1 は(1-101)および(0001)面で構成された GaN 複合ファセット上における Ga 吸着エネルギーを示したものである。GaN 複合ファセット上での(1-101)および(0001)面の最安 定吸着サイトにおける Ga 吸着エネルギーはそれぞれ-1.79 および-1.83 eV である。つまり、(1-101)

および(0001)面で構成された GaN 複合ファセット上 では Ga 原子の吸着に優劣は存在せず、Fig. 1 中の陰 影部に示す平坦な GaN(1-101)および(0001)表面での 最安定吸着サイトにおける Ga 吸着エネルギー(-2.2 および-2.3 eV)と同様の傾向となる。また、GaN 複合 ファセット上における Ga 吸着エネルギーは平坦な GaN 表面上のよりも高くなるが、複合ファセット上 に吸着した Ga 原子は 1.8 eV 程度の高いエネルギー 障壁の影響により、平坦な GaN(1-101)表面へマイグ レーションするのは困難となる。一方、複合ファセ ット上に吸着した Ga 原子が平坦な GaN(0001)表面 にマイグレーションする際に存在するエネルギー 障壁は 0.7 eV 程度と低いため、その効果は小さい。 したがって、複合ファセット上に吸着した Ga 原子 は優先的に平坦な GaN(0001)表面へマイグレーショ ンすることが考えられる。本講演では半極性面と無 極性面で構成された複合ファセット上の吸着 Ga 原 子の挙動にも着目し、キャリアガスに依存した GaN ナノ構造形状の物理的解釈について議論する。

【参考文献】

- [1] S. Li and A. Waag, J. Appl. Phys. 111, 071101 (2012).
- [2] S.-Y. Bae *et al.*, Appl. Phys. Express **6**, 075501 (2013).
- [3] B.-O. Jung et al., CrystEngComm 16, 2273 (2014).
- [4] M. Nami et al., Nanotechnology 28, 025202 (2017).
- [5] Y. Seta et al., Phys. Stat. Sol. B **2020**, 1900523 (2020).

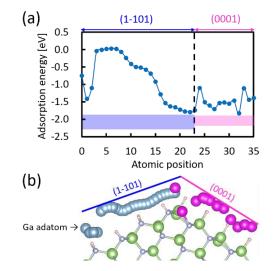


Fig. 1 (a) Calculated adsorption energies on non-planar facet composed by both (1-101) and (0001) planes for H₂ carrier gas. The energy differences at the most stable adsorption sites between flat surfaces and nonplanar facets on (1-101) and (0001) planes are shown in the shaded blue and pink areas, respectively. (b) Computational nonplanar facet model consisting of reconstructed (1-101) and (0001) surfaces (2NH₂+5N-H and 3Ga-H, respectively).