GaN(0001)表面におけるステップ間相互作用に関する理論的検討 Ab initio study for interactions between steps on vicinal GaN(0001) surface

三重大院工, 〇秋山亨, 相可拓巳, 瀬田雄基, 中村浩次, 伊藤智徳 Mie University, OToru Akiyama, Yuki Seta, 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成長条件に依存 してステップバンチングが起こることが知られている。このステップバンチングの起源の一つと して、応力下でのステップ近傍での歪み緩和によるステップ間引力相互に起因するスッテプバン チングが様々な半導体表面において提案されている。[1]GaNにおいても近年、Si基板のGaN(0001) 表面において歪み起因の表面ラフネスが報告されている。[2]これまでに我々は、ステップフロー 成長機構の解明を目的として、AIN(0001)およびGaN(0001)表面におけるステップ端の原子レベルで の構造安定性およびそこで成長過程を第一原理計算にもとづき検討して成長条件に依存したステ ップ端構造および吸着・脱離の挙動を見出してきた。[3-5]本研究では、様々なステップ-テラス構造 を考慮した場合での微傾斜GaN(0001)表面に対する第一原理計算を行い、ステップ間相互作用とス ッテプバンチングとの関係性を議論する。

【結果および考察】Fig. 1 は表面再構成[5]を考 慮した(1×18)および(2×18)微傾斜 GaN(0001)表 面(オフ角~6°に相当)において[1100]方向のス テップ幅を変えた場合での計算モデルおよび そのエネルギー変化をステップ上端および下 端のステップ幅 wstep が均一となる表面でのエ ネルギーを基準として示したものである。テラ ス領域が理想表面および Ga adatom 表面でのエ ネルギーは、テラス幅に対するエネルギー変化 が 0.02 eV/unit cell 以下となるのに対して、表面 が Ga 層で覆われた場合(1 ML excess Ga)ではス ッテプ上端と下端テラス幅が変化するとエネ ルギーが増大して不安定になることがわかる。 このことから、ステップ間の相互作用は表面構 造に依存し、分子線エピタキシャル成長におい て N-rich 条件で安定となる Ga adatom 表面では ステップ間相互作用は殆ど無くスッテプバン チングは表面での動力学的な効果に起因する のもと考えられる。一方、Ga-rich 過剰条件で安 定となる表面では、ステップ幅が均一となるの が安定で斥力的なステップ間相互作用となる こと考えられる。講演では、基板の影響を考慮 した場合での歪みの影響についても議論する。

【参考文献】[1] J. Tersoff *et al.*, Phys. Rev. Lett. **75**, 2730 (1995). [2] T. Narita *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **55**, 05FB001 (2016). [3] T. Akiyama *et al.*, J. Cryst. Growth **532**, 125410 (2020). [4] T. Akiyama *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys., in press (2020). [5] 相可他,第 80 回秋季応物学会 19a-PB5-18 (2019).



Fig. 1 (a) Side views of (1×18) and (2×18) vicinal GaN(0001) surface models considered in this study and (b) calculated energy difference of vicinal GaN(0001) surfaces as a function of step width. Steps along the $[1\overline{1}00]$ direction is considered. Large (small) circles in calculation models denote Ga (N) atoms, respectively. Step width is defined by the distance between Step A and Step B shown in Fig. 1(a).