

第一原理計算による AlN(0001)および GaN(0001)表面での ステップ形成エネルギーの評価

Direct approach for calculating individual energy of step edges on polar AlN(0001) and GaN(0001) surfaces

三重大院工, ○秋山亨, 中谷淳嵩, 清水紀志, 相可拓巳, 伊藤智徳
Mie University, ○T. Akiyama, A. Nakatani, T. Shimizu, T. Ohka, T. Ito
E-mail: akiyama@phen.mie-u.ac.jp

【はじめに】 AlNやGaNをはじめとするIII 族窒化物におけるエピタキシャル成長では様々な表面モフォロジーが出現することが知られており、ステップフローやステップバンチングがV/III 比などの成長条件によって制御できることが報告されている[1]。特に、表面でのステップはエピタキシャル成長における臨界核形成[2]を決定する重要因子となることから、ステップの構造およびその安定性の決定は表面でのステップが関与する現象を理解するうえで重要である。しかしながら、ウルツ鉱(WZ)構造をとるIII族窒化物においてはc軸方向の反転対称中心をもたないことから、ステップの形成エネルギーを評価することは原理的に不可能であり、さらに1分子層のステップを考慮するとWZ構造の積層順(AB積層)に起因して分離不可能な2種類のステップ端が出現してしまう。本研究では、Wedgeモデルを用いた表面エネルギー計算手法[2,3]を適用して、III族窒化物におけるステップ形成エネルギーを計算する手法を考案し、AlN(0001)およびGaN(0001)表面に適用してステップの安定性について議論する。

【結果および考察】 ステップ形成エネルギーを計算するのに用いる微傾斜スラブモデルと同じオフ角となる Wedge モデルを用いることにより底面の寄与を間接的に算出することが可能である。さらに、平坦な(0001)表面上にサイズの異なる三角形の二次元島を積層させたスラブモデルを用いることで、一方のステップ端の形成エネルギーを算出する。Fig. 1(a)はこれらの計算モデルによって得られた AlN(0001)表面におけるステップ形成エネルギーをAl化学ポテンシャルの関数として示したものである。理想表面において2配位のN原子が現れる Step A においては、Al-rich 条件では Fig. 1(b)に示す2配位の窒素原子が脱離した構造が安定となるのに対し、N-rich 条件では Fig. 1(c)に示す水素終端された構造が安定となる。一方、3配位のN原子が現れる Step B においてはN原子は脱離せず Al 化学ポテンシャルに依らずに Fig. 1(d)に示す構造が安定となる。さらに、N-rich 条件において Step A および Step B の形成エネルギーの平均値としての AlN(0001)表面のステップ形成エネルギーは $0.32 \text{ eV/\AA}$ となり、BCF 理論[2]に基づき算出した実験値($0.41 \text{ eV/\AA}$)[1]とも概ね一致したものとなっている。

【参考文献】[1] I. Bryan *et al.*, J. Cryst. Growth **438**, 81 (2016). [2] W. K. Burton *et al.*, Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A **243**, 299 (1951). [3] C. E. Dreyer *et al.*, Phys. Rev. B **89**, 081305 (2014). [4] T. Akiyama *et al.*, Phys. Rev. Materials **3**, 023401 (2019).

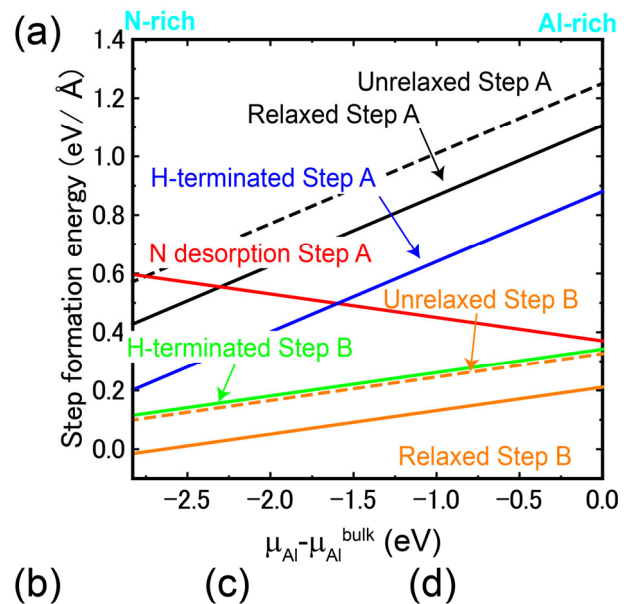


Fig. 1 (a) Calculated step formation energy of various step edge structures on AlN(0001) surface as a function of Al potentials, and side views of the step edges with (b) N desorption at Step A (N-desorption Step A), (c) H-terminated step edge at Step A (H-terminated Step A), and (d) relaxed step edge at Step B (relaxed Step B). The origin of Al chemical potential is set to the energy of the bulk Al.