第一原理計算に基づく AlN(0001)表面上の GaN 層の構造安定性評価

First-principles study for structural stability of GaN layers on AlN(0001) surface

三重大院工, °(M1)足道悠, 秋山亨, 伊藤智徳
Mie University, °Haruka Sokudo, Toru Akiyama and Tomonori Ito
E-mail: 421m609@m.mie-u.ac.jp

【はじめに】Al を多く含む $Al_xGa_{1-x}N$ 系の紫外線発光ダイオード(UV-LED)は、様々な分野で重要な役割を果たしており、欠かせない光源となっている。UV-LED において、深紫外域(波長 200-300nm)で発光するためには、GaN 量子井戸(QW)を非常に薄くする必要があり、近年 MOVPE で成長された AlN 表面上の GaN の厚さが表面の Ga adatom の結晶化と蒸発のバランスから単層スケールで制御可能であることが報告されている[1]。しかしながら、単層スケールで自己制限成長されるメカニズムは不明である。これまでに我々は、AlN および GaN において様々な面方位での表面エネルギーを第一原理計算によって算出し、各結晶構造における表面構造と成長条件との関係性を明らかにした[2]。本研究では、自己制限成長のメカニズムを明らかにするために、AlN(0001)上に成長する GaN 層における表面構造および安定性の膜厚依存性を第一原理計算に基づき検討する。AlN(0001)表面上の GaN 層の表面再構成として様々な構造を考慮して表面エネルギーを wedge-shape geometry 法[3]によって算出し、GaN の表面構造安定性および表面エネルギーに対する GaN 膜厚の効果を議論する。

【結果および考察】Fig.1 は各再構成表面での表面エネルギーを Ga の化学ポテンシャルの関数として表したものである。ここでの表面エネルギーは 4 bilayer の AlN 層の上に 1 bilayer の GaN を積層させたものに対するものである。この図から、安定となる表面構造が Ga の化学ポテンシャルに依存して変化し、Ga-rich 条件下において Ga bilayer が安定構造となる。N-rich 条件下においては NH_2 と NH が吸着した表面(Ga-NH_2+Ga-NH)が安定構造となることが分かる。この表面構造および表面エネルギーは 2 bilayer 以上の GaN 層においても大きな変化は無く、表面の安定性においては膜厚依存性がないことが推測される。講演では、表面での原子の吸着・脱離の挙動に関する計算結果についても議論する。

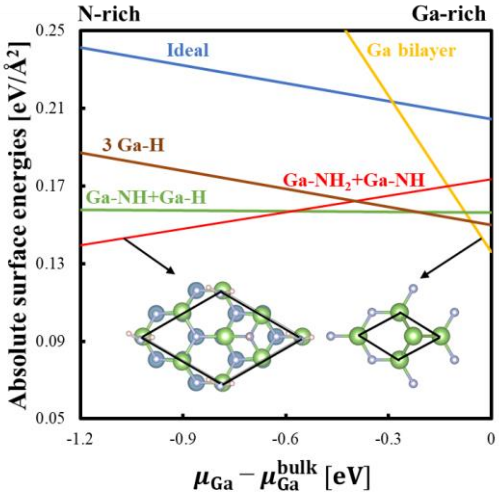

Fig. 1 Calculated absolute surface energies of the GaN on AlN(0001) surface for various surfaces as a function of Ga chemical potentials. Green, blue, white and pink circles denote the geometries Ga, Al, N and H atoms, respectively.

[参考文献] [1] H. Kobayashi *et al*., Adv. Optical Mater. **7**, 1900860 (2019) [2] T. Akiyama *et al*., Phys. Rev. Mater. **3**, 023401 (2019) [3] C.E. Dreyer *et al*., Phys. Rev. B **89**. 081305(2014)