

ステップおよびキンクを含む AlN(0001)表面での原子の吸着に関する理論解析 Theoretical study for adsorption behavior of various types of adatoms on AlN(0001) surface with steps and kinks

三重大院工、○秋山亨, 河村貴宏

Mie Univ., ○Toru Akiyama, Takahiro Kawamura

E-mail: akiyama@phen.mie-u.ac.jp

【はじめに】 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 界面においては混晶組成が緩やかに変化し急峻性が劣化する現象(組成引き込み)が起こり、混晶組成の制御が重要な課題となっている[1]。近年、 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ における組成引き込みが歪みに起因するのではなく表面モフォロジーに依存したGa原子の取り込みに起因することが提案されており[2]、ステップでのAlおよびGa原子の表面での振る舞いの違いを明らかにすることはこの現象を理解するうえで重要な知見となることが期待される。また、不純物の取り込みに関しても表面に出現するステップやキンクによる影響も考えられる[3]。これまでに我々は、ステップおよびキンクを含むAlN(0001)表面を考慮して、表面構造安定性および吸着・脱離の挙動を第一原理計算によって解析することでステップフロー成長におけるキンクの影響を検討してきた[4, 5]。本研究では、原子種として様々な元素を考慮して、平坦面およびステップとキンクを含むAlN(0001)表面での吸着の挙動におけるステップおよびキンクの影響を検討する。平坦面は(2×2)周期スラブモデルを、ステップとキンクを含む表面は($\sqrt{61} \times \sqrt{21}$)周期スラブモデルを用いて模し、第一原理計算によって得られる全エネルギーより吸着エネルギーを計算する。

【結果および考察】

Table 1 は、各原子種における平坦面、ステップ端およびキンクにおける吸着エネルギーを示したものである。Al 原子においては平坦面に比べてステップ端およびキンクにおける吸着エネルギーが低くなるのに対して、N 原子においては平坦面における吸着エネルギー

Table 1. Calculated adsorption energies (in eV) of C, N, O, Mg, Al, and Ga adatoms on flat AlN(0001) surface, and vicinal AlN(0001) surface with and without kinks. Data in Refs. 4 and 5 are used for Al and N adatoms. The reconstruction consisting of H-terminated N atoms and Al-H bonds ($\text{N}_{\text{ad}}\text{-H}+\text{Al-H}$) in Ref. 5 is considered.

Species	Flat surface	Step edge w/o kinks	Step edge with kinks
C	-5.17	-5.59	-5.12
N	-4.17	-3.06	-1.84
O	-6.89	-3.13	-3.60
Mg	-0.37	-1.80	-3.53
Al	-2.03	-3.93	-3.82
Ga	-1.31	-2.37	-3.40

が低く、それぞれ表面での吸着の挙動が異なることが示唆される。すなわち、Al 原子はステップ端に取り込まれやすいのに対して N 原子はテラスに優先的に吸着することが考えられる。Al 原子と同じ III 族元素である Ga 原子および II 族元素である Mg 原子は Al 原子と同様の傾向を示し、ステップ端およびキンクでの吸着エネルギーが低くなる。しかしながら、吸着する際に結合する N 原子との結合(Mg-N および Ga-N ボンド)の強さに起因して、その吸着エネルギーは Al 原子のそれ(Al-N ボンド)とは異なっており、これらの元素は取り込まれ難い傾向がみられる。また VI 族元素である O 原子は、V 族元素である N 原子と同様の傾向を示し平坦面における吸着エネルギーが低くなり、テラスに優先的に吸着することが考えられる。一方、IV 族元素である C 原子においては、表面の形態に依存せず、いずれの箇所においても吸着し得ることが解る。これら原子種に依存した吸着の挙動の違いは、ステップフロー成長における不純物の取込みおよび組成変調を理解するうえで重要となることを示唆している。

【参考文献】 [1] B. Liu *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **98**, 261916 (2011). [2] J. H. Dycus *et al.* *Appl. Phys. Lett.* **114**, 031602 (2019). [3] T. Akiyama *et al.*, *Phys. Status Solidi B* **261**, 2300573 (2024). [4] T. Akiyama *et al.*, *J. Cryst. Growth* **571**, 126244 (2021). [5] T. Akiyama *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.* **63**, 02SP71 (2024).