

28aB07

InGaN の非混和性に対する基板拘束の寄与

Contribution of Lattice Constraint to Compositional Instability of InGaN

学習院大学 計算機センター 寒川 義裕、三重大学 工学部 物理工学科 伊藤 智徳、
徳島大学 工学部 光応用工学科 森 篤史、東京農工大学 工学部 応用化学科 纘瀬 明伯

Computer Center, Gakushuin University, Y. KANGAWA

Department of Physics Engineering, Mie University, T. ITO

Department of Optical Science and Technology, The University of Tokushima, A. MORI

Department of Applied Chemistry, Tokyo University of Agriculture and Technology, A. KOUKITU

We carried out excess energy calculations for bulk InGaN, InGaN/GaN and InGaN/InN in order to investigate the contribution of lattice constraint from the bottom layer to the compositional instability of InGaN. In the epi-layers, asymmetric nature of the excess energy curves as a function of composition is emphasized compared with that for bulk. The results suggest that incorporating the contribution of the lattice constraint is indispensable to predict the compositional instability for InGaN grown on substrates.

高効率青色発光ダイオード等の光学素子材料として用いられている InGaN 窒化物半導体において、非混和性の存在は良く知られている [1]。また、InGaN の非混和性は光学素子特性の向上に期待される量子ドットの自己形成に有用な役割を果たす [2]。このように、InGaN の非混和性に対する理解は光学素子や電子素子を開発する上できわめて重要である。しかしながら、これまでの InGaN の非混和領域の研究の多くはバルクを対象としており [3, 4]、基板からの格子拘束 (基板拘束) を受けるヘテロ エピタキシャル成長させた InGaN 薄膜における非混和領域の研究はごく稀である [5]。本研究では、原子間ポテンシャル [6] を用いて、バルク状態の InGaN、エピタキシャル状態の InGaN/(0001)GaN および InGaN/(0001)InN における過剰エネルギーを算出し、基板拘束がエピ層の非混和性に与える影響を検討した。

原子間ポテンシャル計算により、バルク状態の InGaN および InGaN 薄膜の凝集エネルギーを見積もり、次式を用いて過剰エネルギー ΔE を得た $\Delta E = E_x - \{x E_{10} + (1-x) E_{00}\}$ 。ここで、 E_x , E_{10} , E_{00} はそれぞれ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, InN, GaN の凝集エネルギーである。InGaN 薄膜の凝集エネルギー計算は、基板面に平行な a 軸を GaN あるいは InN の値に固定し、 c 軸を緩和させることにより行った。Fig. 1 に In 組成の変化に伴う過剰エネルギーの変化を示す。バルク状態では過剰エネルギーの組成依存性がほぼ対称である (Fig. 1(a)) のに対し、GaN および InN 上の InGaN 薄膜では (Fig. 1(b), (c)) 基板拘束により強い非対称性をもつことがわかる。特に、InGaN/InN では、ほぼ全ての組成域においてバルクよりも低い過剰エネルギー値を示し、InGaN/GaN では、 $x > 0.65$ においてバルクよりも高い過剰エネルギー値をもつことが特徴的である。このことは、基板拘束により GaN 上において高 In 組成 ($x > 0.65$) の混晶がバルクに比べて不安定となることを示している。以上の結果は、薄膜の非混和領域の解析において、バルク状態で通常用いられる正則溶体近似が適用できないことを示唆している。

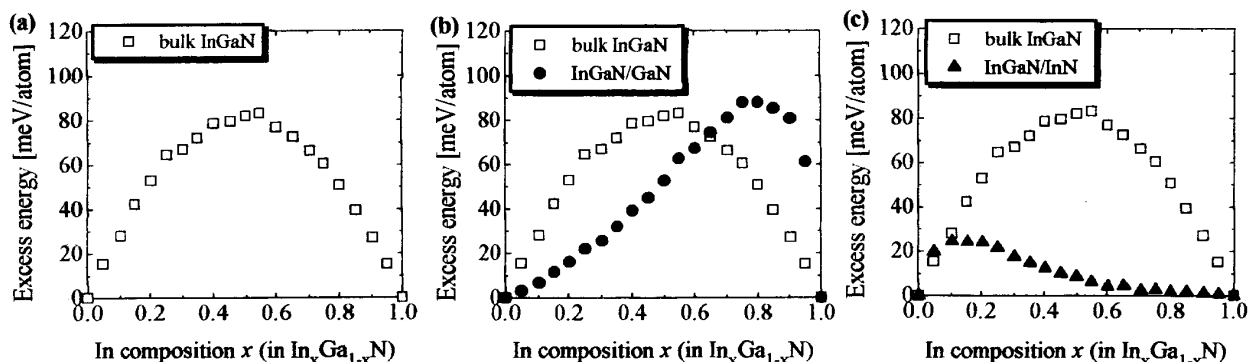


Fig. 1 Excess energy curves as a function of indium composition: (a) bulk InGaN, (b) InGaN/GaN, (c) InGaN/InN.

- [1] A. Koukitu, N. Takahashi, T. Taki, H. Seki: *J. Cryst. Growth* **170**(1997)306.
- [2] Y. Narukawa, Y. Kawakami, M. Funato, Sz. Fujita, Sg. Fujita, S. Nakamura: *Appl. Phys. Lett.* **70**(1997)981.
- [3] I. Ho, G. B. Stringfellow: *Appl. Phys. Lett.* **69**(1996)2701.
- [4] T. Ito: *Jpn. J. Appl. Phys.* **36**(1997)L1065.
- [5] A. Mori, T. Ito, T. Toyama, N. Kase: *Proceedings of the 2nd International Conference on Advanced Materials Development and Performance*, eds. I. Nakabayashi, and R. Murakami, (1999)p714.
- [6] T. Ito: *Jpn. J. Appl. Phys.* **37**(1998)L1217.