

InN/GaNヘテロ構造形成過程でのIII族元素の原子配置に関する理論的研究

Theoretical Investigation for Atomic Position of III Group Elements in Growth Process of InN/GaN Hetero Structure

三重大院工, °伊藤 綾子, 秋山 亨, 中村 浩次, 伊藤 智徳

Department of Physics Eng., Mie Univ., °Ayako Ito, Toru Akiyama, Kohji Nakamura, Tomonori Ito

E-mail: 413M604@m.mie-u.ac.jp

【はじめに】InNは長波長領域での発光デバイスの応用が可能な材料として注目されている。さらに近年では、分子線エピタキシャル成長(MBE)を用いて、GaN基板上にInN層を積層させたInN/GaNヘテロ構造の作製が試みられている[1]。しかしながら、InNとGaNの格子不整合(11.2%)によってInN/GaNヘテロ構造のInN層の層厚が不均一となり、発光効率の低下や発光波長の制御が困難となっている。また、成長条件下におけるInN層の安定性やヘテロ構造形成の要因についても不明な点が多い。そこで本研究では、InN/GaNヘテロ構造形成時でのIII族元素の原子配列に対するモンテカルロ(MC)シミュレーション[2]を実行して、ヘテロ構造の安定性および形成条件を理論的に検討する。

【計算方法】一般化密度勾配近似および擬ポテンシャル法を用いた第一原理計算より様々な原子配置での $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 表面の全エネルギーを算出し、それらを用いたMCシミュレーションにより、実験温度(850 K)での原子配置および構造の決定を行う。

【結果および考察】第一原理計算の結果、GaN基板上のInN層はN原子の吸着によってInの脱離および変位が促進され形成されることが分かった。

さらに、高In組成のInN層に起因する格子ひずみにより表面のInは2層目のGaと置換し得ることも見出した。図1はこれら第一原理計算の結果を用いたMCシミュレーションによって得られた、GaN(0001)基板上での $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ のIn組成を示したものである。この図からInN層が1MLの場合においてはInが表面に偏析し、InN/GaNヘテロ構造を形成していることがわかる。これは、In-N (4.01 eV/atom)よりもGa-N(4.49 eV/atom)のボンドエネルギーが大きいため、Ga-Nボンドが多い(Inが表面に偏析した)構造が安定となるためである。また、InN層の層数の増大に伴ってIn組成が均一になる傾向がみられる。以上の結果は、InN層が1ML程度の薄膜において急峻なInN/GaNヘテロ構造が形成される可能性を示唆している。

【参考文献】

- [1] N. Hashimoto, A. Yuki, H. Saito, X. Wang, S.B. Che, and Y. Isihitani, A. Yoshikawa, J. IEICE., **76** 93-96 (2007).
 [2] S. Inahama, T. Akiyama, K. Nakamura, and T. Ito, e-J. Surf. Sci. Nanotech., **3** 503-506 (2005).

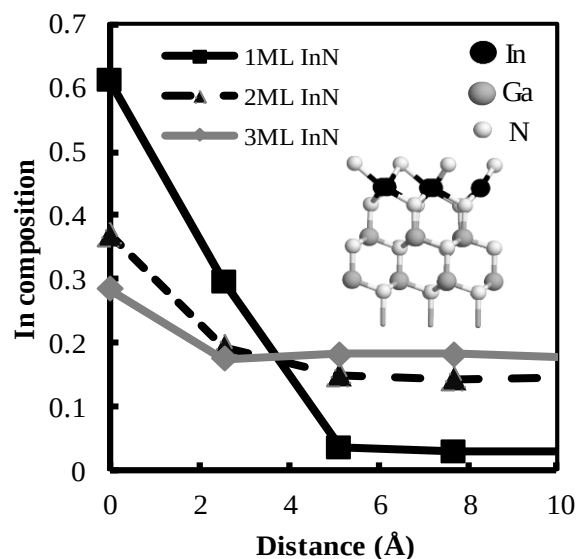


Fig. 1: In composition as a function of distance from surface in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. Solid black, dashed, and gray lines denote 1, 2, and 3ML InN, respectively. Geometry of 1ML InN on GaN substrate is also shown.