

$\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y/\text{GaAs}(001)$ 薄膜の混和性に関する理論的検討 Theoretical investigation for miscibility of $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y/\text{GaAs}(001)$ thin film

三重大院工, °牧原敬宏, 秋山亨, 中村浩次, 伊藤智徳

Mie University, °Takahiro Makihara, Toru Akiyama, Kohji Nakamura, Tomonori Ito

E-mail: 412m615@m.mie-u.ac.jp

【はじめに】 GaAsBi に N 原子を添加した $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y$ は禁制帯幅の温度依存性が小さいこと, N および Bi の組成を変えることで禁制帯幅を制御することが可能なことから, 光通信用半導体レーザとしての応用が期待されている[1]. その実現には, 禁制帯幅を光通信の波長帯に適合させるとともに $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y$ の格子定数を基板材料に整合させる必要があり, N および Bi の組成制御が不可欠である. 一方, 混晶薄膜の熱力学安定性を議論する上で, 基板からの格子拘束を考慮する重要性が指摘されている[2,3]. これまでに我々は, $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y$ において, Ga-N 結合が他の結合に比べ強いいため, Ga-N 結合長の変化を抑制するように Ga-N が層状偏析することを見出した[4]. 本研究では, 表面構造を考慮した $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y$ 擬三元系薄膜の混和性に対する表面の影響を検討する.

【結果および考察】 Khor-Das Sarma 型の経験的原子間ポテンシャル[5]を用いて, 各状態における凝集エネルギーを算出し, さらにモンテカルロシミュレーションにより, 平衡状態における原子配列を決定する. Fig.1 は $\text{GaAs}(001)$ 基板上での (2×1) 表面構造の $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y$ 混晶における原子配列を示している. この図より, すべての組成において, Bi が表面に偏析していることが分かる. さらに N 組成の増大に伴い, 層状偏析が顕著となることが確認できる. Fig.2 は $\text{GaN}_{0.10}\text{As}_{0.40}\text{Bi}_{0.50}$ 混晶でのバルク状態および薄膜でのボンド長分布であり, ボンド長が $2.65[\text{\AA}]$ より長い領域においてバルク状態と薄膜でのボンド長分布に違いが見られるのがわかる. これは薄膜での結晶中の Ga-Bi の凝集エネルギーが, Ga-As および Ga-N の凝集エネルギーよりも 0.5eV 以上高いため, Ga-Bi ボンドを減少するように Bi 原子が表面に偏析するためである. そして表面でのひずみ緩和のため, 表面付近に存在する Bi-Bi , Ga-Bi ボンドが平衡ボンド長に近づき, 異なるピークが出現すると考えられる. 以上の結果は, $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y$ 混晶の表面構造が, $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y$ 混晶の原子配列を決定する重要な役割を果たしていることを示唆している.

[1] W. Huang, M. Yoshimoto, Y. Takehara, J. Saraie, and K. Oe, Jpn. J. Appl. Phys. **43** (2004) 1350.

[2] T. Suda, Y. Kangawa, K. Nakamura, and T. Ito, J. Cryst. Growth **258** (2003) 277.

[3] T. Ito, N. Takasu, T. Akiyama, and K. Nakamura, Appl. Surf. Sci. **256** (2009) 1218.

[4] 牧原 他: 第 73 回応用物理学会学術講演会 14a-J-7.

[5] T. Ito, K. E. Khor, and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **40** (1989) 9715.

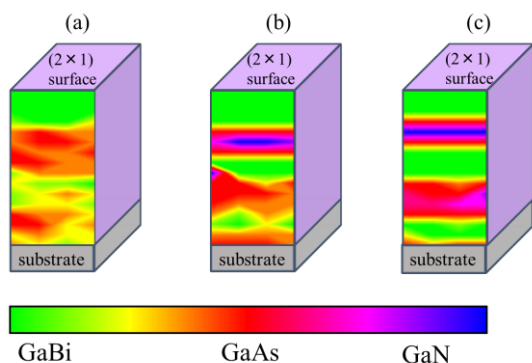


Fig.1. Simulated equilibrium atomic arrangements for (a) $\text{GaAs}_{0.50}\text{Bi}_{0.50}$, (b) $\text{GaN}_{0.05}\text{As}_{0.45}\text{Bi}_{0.50}$, and (c) $\text{GaN}_{0.10}\text{As}_{0.40}\text{Bi}_{0.50}$ on $\text{GaAs}(001)$ substrate (a_{sub} is $5.65[\text{\AA}]$.) in (2×1) surface structure.

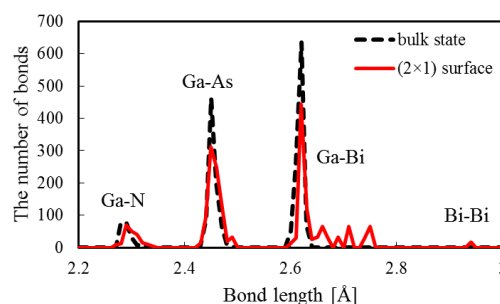


Fig.2. Distribution of interatomic bonds for $\text{GaN}_{0.10}\text{As}_{0.40}\text{Bi}_{0.50}$ on $\text{GaAs}(001)$ substrate (a_{sub} is $5.65[\text{\AA}]$.) . Solid and dashed lines represent the results in (2×1) surface and bulk phase, respectively.