

InGaN 成長における In 取り込みの面方位依存性の理論検討

Theoretical investigation of the surface orientation dependence of In-incorporation
during InGaN growth

農工大院工 ○藤村 侑, 村上 尚, 熊谷義直, 額額明伯

Tokyo Univ. of Agri. and Tech.,

○Yu Fujimura, Hisashi Murakami, Yoshinao Kumagai, Akinori Koukitu

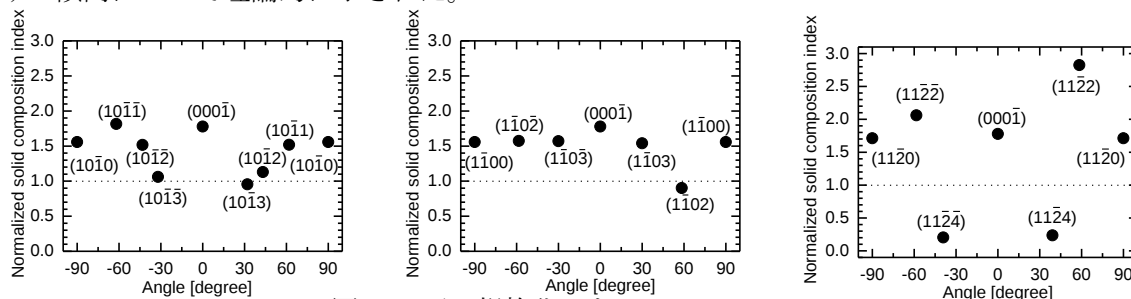
E-mail: koukitu@cc.tuat.ac.jp

はじめに

高効率な発光デバイスを目指して種々の面方位への InGaN 成長が盛んに行われ、特に、無極性あるいは半極性面上への In 取り込み量の増加に焦点が当てられている¹⁾。成長の駆動力は結晶成長反応の自由エネルギー変化の大きさに左右される。一般に、混晶成長反応の自由エネルギー変化は $\Delta G = \Delta G_{\text{reaction}} + \Delta G_{\text{mixing}}$ で示され、反応による自由エネルギー変化と混合によるエネルギー変化の和となる。通常、物理定数として得られる成長反応の Gibbs の自由エネルギー変化は、成長方向などは考慮されていないため、従来の熱力学解析では成長方位の影響については議論できない。この目的のため、屋山らは、第一原理計算と統計力学的手法を用いて熱力学データを求め、熱力学解析により析出組成の面方位依存性を報告している²⁾。一方、我々の研究グループは III-Cl₃ を原料とする新しい HVPE 成長を提案しており、ここでは、InGaN-HVPE 成長の析出組成の面方位依存性について考察したので報告する。

計算方法・結果

本研究では、第一原理計算と統計力学手法を用いて生成の Gibbs の自由エネルギーを導出した。スラブモデルとしては 8 ML と 10 ML のモデルを用いて、規格化した。気相成長における固相組成は、単純に生成反応の自由エネルギー変化や平衡定数の値のみで決まるものではないが、同条件下で成長面方位のみを議論する場合には、InN および GaN の平衡定数を用いた指標により、析出組成の傾向を掴むことが可能である。図 1 に C 面で規格化した $K_{\text{InN}}/(K_{\text{InN}}+K_{\text{GaN}})$ を示す。本計算では成長温度を 1000K とした。この計算により InGaN-HVPE 成長における各面方位上での In 取り込みの傾向について理論的に示された。

図 1. C 面で規格化した $K_{\text{InN}}/(K_{\text{InN}}+K_{\text{GaN}})$

参考文献

- 1) T. Wernicke *et al.*, Abstract Book of ICNS-8, Vol.2 (2009) p. 955.
- 2) T. Yayama *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys., 52 (2013) 08JC02.