窒化物半導体における貫通転位近傍での原子偏析に関する理論的研究

Theoretical investigations for atom segregation around threading dislocations in nitride semiconductors

三重大院工，〇坂口涼平，秋山亨，中村浩次，伊藤智徳
Mie University, 〇Ryohei Sakaguchi, Toru Akiyama, Kohji Nakamura, Tomonori Ito
E-mail: 414m607@m.mie-u.ac.jp

【はじめに】GaN 系窒化物半導体は、貫通転位密度が高い場合においても高効率発光が可能であることから、主に近紫外から青色領域にかけての発光デバイスとして応用されている。しかしながら、高 In および Al 組成においては基板界面、表面および貫通転位近傍で原子の不均一性が観測されており[1,2]、組成の均一な結晶を得ることは困難とされている。これまでに我々は、GaN 基板上の InGaN において表面およびミスフィット転位近傍で In 原子が偏析して、格子不整合に起因する歪みが軽減されることを明らかにしてきた[3]。本研究では、InGaN および AlGaN における貫通転位近傍での原子配列を解析し、原子偏析と転位芯構造との関係性を検討する。

【結果および考察】Fig.1 は、Khor-Das Sarma 型の経験的原子間ポテンシャル[4]およびモンテカルロシミュレーションによって得られた、$Al_{0.3}Ga_{0.7}N$ における刃状転位(5/7core[5])での Al 原子の割合を転位芯を含む[-1100]方向の軸からの距離の関数として示したものである。この図から、Al 原子は転位芯近傍に多く分布していることが確認でき、エネルギー分散型 X 線分析による結果とも定性的に一致している[2]。これは、[11-20]方向における転位芯近傍の III-N ボンド長がバルクのものに比べて短く、Al 組成を増加させることで格子歪みを緩和していると考えられる。Fig.2 は、$In_{0.2}Ga_{0.8}N$ における刃状転位(5/7core)での In 原子の割合を転位芯を含む[11-20]方向の軸からの距離の関数として示したものであり、すべり面を境として In 組成に顕著な違いが生じている。これは、すべり面を境に III-N ボンド長に差ができるため、In 組成を変化させることで平衡ボンド長に近い原子配置をとっているものと考えられる。

[1] F. A. Ponce et al., Phys. Stat. Sol. B **240** (2003) 273. [2] L. Chang et al., Appl. Phys. Lett. **79** (2001) 928. [3] T. Ito et al., J. Cryst. Growth **298** (2007) 186. [4] T. Ito et al., Phys. Rev. B **40** (1989) 9715. [5] A. Béré et al., Comput. Mater. Sci. **24** (2002) 144.

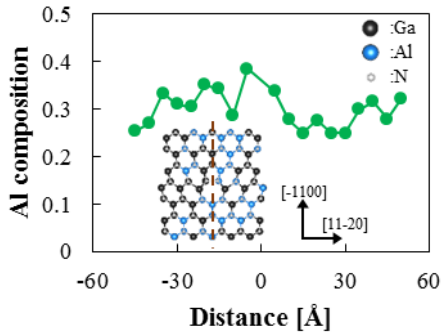

Fig.1. Calculated Al composition as a function of distance from dislocation core across [11-20] in $Al_{0.3}Ga_{0.7}N$. Atomic arrangement around edge dislocation core in $Al_{0.3}Ga_{0.7}N$ is also shown.

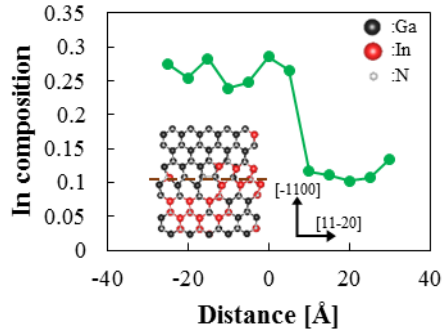

Fig.2. Calculated In composition as a function of distance from dislocation core across [-1100] in $In_{0.2}Ga_{0.8}N$. Atomic arrangement around edge dislocation core in $In_{0.2}Ga_{0.8}N$ is also shown.

© 2015年 応用物理学会