

# ボンドエンジニアリングによる特異構造形成へのアプローチ

## Bond engineering approach to singularity in crystals

三重大院工<sup>1</sup> ○伊藤 智徳<sup>1</sup>

Mie Univ.<sup>1</sup>, ○Tomonori Ito<sup>1</sup>

E-mail: tom@phen.mie-u.ac.jp

1. はじめに ボンドエンジニアリング概念は、ボンド電荷が  $2e$  と異なるボンド（ヘテロボンド）を含む系においては、ヘテロボンドが系の特異性を規定するという知見 [1] に基づいている。本講演では、ボンドエンジニアリングの立場から、窒化物半導体における特異構造形成について議論を行う。

2. 計算方法 計算方法としては経験的原子間ポテンシャル、非経験的擬ポテンシャル、量子論的アプローチならびにモンテカルロ (MC) 法を用いる。また欠陥としての界面（界面転位）、表面（表面再構成）を特異構造形成の場とすることで、特に偏析を中心に検討を行う。

3. 計算結果及び考察 図 1(a)は GaN(0001)上に形成された  $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$  薄膜について、表面下各層の In 組成分布（原子間ポテンシャルと MC による計算結果）を示したものである。In 原子の表面および界面での偏析が認められる。図中に示すように、特に界面では転位に沿っての偏析が顕著であり、In 原子の 1 次元的なネットワークが形成される。これは、格子不整合に伴う界面ひずみの緩和ならびに In 原子がダングリンドを含む 3 配位構造を Ga 原子よりも好むことに起因している。図 1(b)は metal-rich 条件で出現する  $\text{InGaN}(0001)$  表面（2 層の In が最表面に存在する擬  $(1 \times 1)$  表面）に N を供給した際の表面下各層の In 組成分布（量子論的アプローチと MC による計算結果）を示したものである。この表面においては 1.7 原子層の

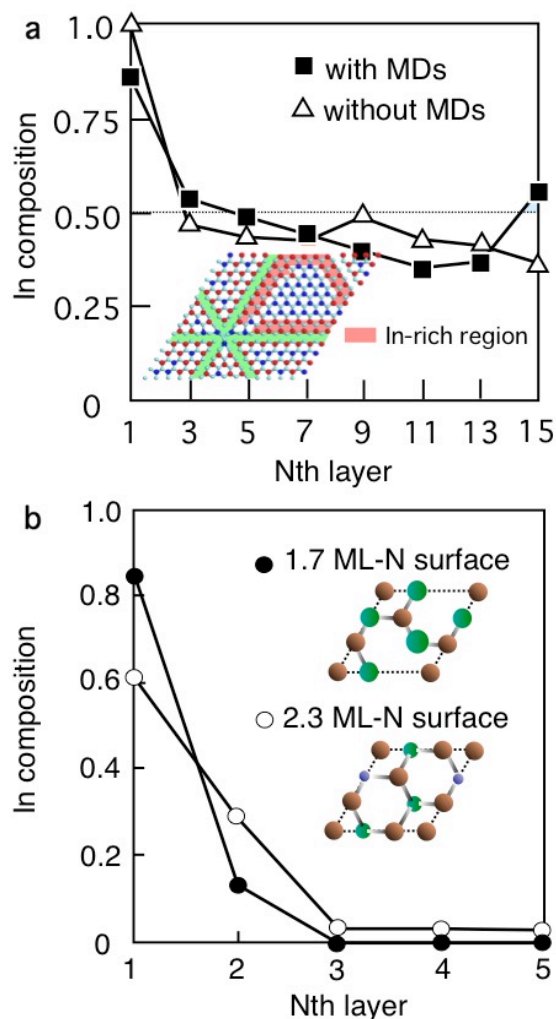


図 1： InGaN 薄膜での界面，表面偏析。

N 供給において In の表面偏析が顕著であり、InN 表面層を形成するが、N 供給が増大するにつれ、InGaN 表面層に変化することがわかる。これらを含めて、ヘテロボンドに注目した、界面、表面を場とする特異構造形成に関する知見を紹介する。

### 参考文献

[1] T. Ito, J. Appl. Phys. **77** (1995) 4845.