結晶成長条件下における窒化物半導体非極性表面の安定性

Theoretical investigations for the stability of nitride semiconductor nonpolar surfaces

三重大院工 [1]，○伊藤 智徳 [1]

Mie Univ. [1], Tomonori Ito[1]

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

1. はじめに　窒化物半導体を用いた発光素子の高効率化に向けて，分極の影響を排除しうる非極性表面を用いた多くの研究が行われている。本講演では，特異構造形成の「場」としての観点から，非極性表面の結晶成長条件下での安定性について議論を行う。

2. 計算方法　計算方法としては非経験的擬ポテンシャル，量子論的アプローチを用いて，結晶成長条件（温度，圧力）の関数としての表面構造安定性を検討する。

3. 計算結果及び考察　図 1 に水素吸着した，GaN 極性 (0001)，無極性 (11-20)，半極性 (11-22) 表面構造状態図の計算結果を示す。低温領域においては Ga 2 原子層あるいは液滴が安定となり，高温領域においては GaN の分解が生じる。中間温度領域では，極性 (0001) 表面において，N 吸着原子が H と結合，Ga 原子が H と結合した状態が混在する相（Nad-H+Ga-H）がより低温で，昇温に伴い Ga が脱離することで，Ga 原子が H と結合した状態に代わって NH_2 が混在する相（Nad-H+NH_2）が出現する。同様の傾向は，無極性 (11-20) 表面の結果においても認められる。一方，半極性 (11-22) 表面においては，Ga は脱離せず，N-H+Ga-NH+Ga-NH_2 の状態が広い成長条件で安定となることがわかる。同様の結果は，半極性 (1-101) 表面においても得られた。以上の結果は，半極性表面では極性，無極性表面と異なり，広い温度，圧力領域で 1 つの安定表面が保たれることから，結晶成長における成長条件依存性が小さくなることを示唆している。これに対し，InN 表面では様相が異なる。具体的には，InN の表面安定領域ひいては成長可能領域の低温化を反映して，極性 (0001) 表面は Nad-H+In-NH_2，無極性 (11-20) および半極性 (11-22)，(1-101) 表面は N-H+In-NH_2 と似通った状態で安定化され，成長過程に対する方位依存性は小さくなる。

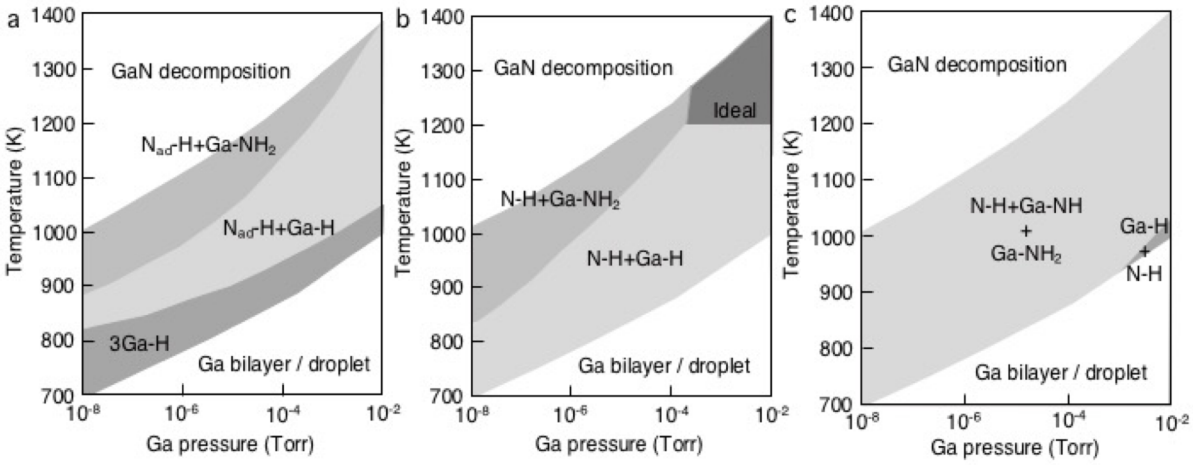

図 1．(a) GaN 極性 (0001)，(b) 無極性(11-20)，(c) 半極性(11-22)表面構造状態図の計算結果。

© 2016年 応用物理学会