

InGaN 薄膜成長における格子不整合と In 組成の相関

Relationship between lattice mismatch and indium composition in InGaN thin films

九大院工¹, 九大応力研², 名大未来研³, 三重大院工⁴

○稲富悠也¹, 寒川義裕^{1,2,3}, 伊藤智徳⁴, 柿本浩一^{1,2}

Dept. Aeronautics and Astronautics¹, RIAM², Kyushu Univ., IMASS, Nagoya Univ.³, Mie Univ.⁴

○Yuya Inatomi¹, Yoshihiro Kangawa^{1,2,3}, Tomonori Ito⁴, Koichi Kakimoto^{1,2}

E-mail: inatomi@riam.kyushu-u.ac.jp

すべての可視光領域を網羅する発光デバイスの実現には高 In 組成の InGaN 薄膜成長が必要である。しかし、GaN 基板に成長した InGaN 薄膜には、その成長初期段階において In 組成が低くなる現象が報告されている。この現象は組成引き込み効果[1]と呼ばれる。この原因は、定性的には、GaN 基板と InGaN 薄膜の格子定数差から、高 In 組成 InGaN がエネルギー的に不安定であることと考えられている。本研究では InGaN 薄膜成長における格子不整合と In 組成の相関を理論的に解析した。

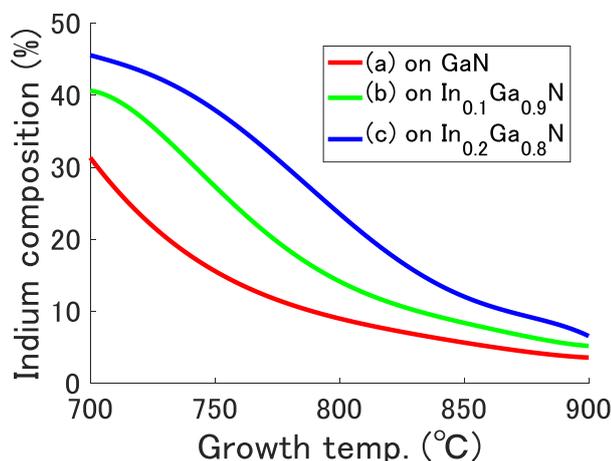
本研究では原子間ポテンシャル計算[2]と熱力学解析[3]に基づいて理論解析を行った。原子間ポテンシャル計算では、InGaN が基板拘束により受けるひずみエネルギーおよび Ga と In の混合によるエネルギー損失(混合エンタルピー)を定量的に評価することができる。In 組成 x の $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ が (a) GaN (b) $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$ (c) $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 上にコヒーレント成長すると仮定し、それぞれのひずみエネルギーおよび混合エネルギーを x の関数として計算した。熱力学解析では物質の自由エネルギーを基に、与えられた成長条件と In 組成の関係を予測することができる。この自由エネルギーを上述の方法で計算したひずみ・混合エンタルピーで補正することにより、格子不整合と In 組成の相関を解析することができる。ここでは MOVPE 成長を考え、成長温度 (T) の依存性を解析した。

Figure 1 に InGaN 薄膜の In 組成 x と成長温度 (T) の関係を示す。(c)、(b)、(a) の順で高 In 組成を実現しやすくなっていることがわかる。これは基板との格子不整合が小さくなるに連れて系のエネルギー損失が緩和され、In 取込み効率が向上したことによる。この結果は組成引き込み効果をよく説明している。また、同じ基板で In 組成を増すためには、成長温度が低い条件が好ましいこともわかる。これは経験則と一致する。以上のように、原子間ポテンシャル計算と熱力学解析に基づく理論解析により格子不整合と InGaN 薄膜の In 組成との相関が示された。

謝辞：本研究の一部は、JSPS 科研費 JP16H06418 の助成を受けて行われました。

参考文献：

- [1] M. Shimizu et al., Solid-State Electron. **41**, 145(1997). [2] T. Ito, Jpn. J. Appl. Phys. **37** L574(1998).
[3] A. Koukitu et al., J. Crystal Growth **170** 306 (1997).



($p_{\text{Ga}} = p_{\text{In}} = 0.5 \times 10^{-5}$ (atm), $V/\text{III} = 2.0 \times 10^4$, NH_3 分解率=10%)

Figure 1 Relationship between growth temperature and indium composition in InGaN thin films grown on (a) GaN, (b) $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$ and (c) $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$.