

InGaN の表面-バルク電子状態評価

Surface and Bulk Electronic Structures of InGaN

物材機構¹, SPring-8 物材機構², 都産技研³, 大阪府大⁴, 工学院大⁵, 立命館大⁶

井村将隆¹, 津田俊輔¹, 長田貴弘¹, 山下良之^{1,2}, 吉川英樹^{1,2}, 小林啓介², 小出康夫¹,

太田優一³, 村田秀信⁴, 山口智広⁵, 金子昌充⁶, 荒木努⁶, 名西やすし⁶

NIMS¹, SPring-8 NIMS², TIRI³, Osaka Pref. Univ.⁴, Kogakuin Univ.⁵, Ritsumeikan Univ.⁶

M. Imura¹, S. Tsuda¹, T. Nagata¹, Y. Yamashita², H. Yoshikawa², K. Kobayashi², Y. Koide¹,

Y. Ota³, H. Murata⁴, T. Yamaguchi⁵, M. Kaneko⁶, T. Araki⁶, and Y. Nanishi⁶

E-mail: Imura.masataka@nims.go.jp

背景 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($0 \leq x \leq 1$) の電子状態評価は、Al K α や Mg K α を単色光源とした軟 X 線光電子分光法(SX-PES)及び第一原理計算により積極的に行われてきた。しかしながら、 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ の電子状態は、表面とバルクにて異なっているため、SX-PES により得られる光電子の脱出深さを考慮すると、これまでの評価・報告結果は、 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ のバルク(本質的な)電子状態のものとは考えにくい。したがって、第一原理計算による理論結果及び実験結果との比較についても、再検討が必要な状況であると考えられる。そこで本研究では放射光を単色光源とした硬 X 線光電子分光法(HX-PES)により $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($0 \leq x \leq 1$) の表面-バルクの電子状態を系統的に評価した。続いて実験的に得られた光電子スペクトルを理論的に解析評価するために複数の計算コードを用いて第一原理計算を行った。

実験および結果 RF-MBE 法により c 面 GaN テンプレート上に、In 組成の異なる $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ を 500 nm 成長させた。図 1 に一番バルク敏感な測定条件により得られた HX-PES スペクトルの結果をまとめた。(a)は Ga 3d, In 4d 内殻準位近傍、(b)は価電子帯(VB)のスペクトルである。どちらのスペクトルも、各元素の最外殻電子にて形成された結合性軌道を反映した形状を有している。VB 端に関しては各 In 組成に対するエネルギーギャップの変化に対応して深くなっており、各スペクトルは主にバンドベンディングの影響を受けて広がっている。これら実験で得られたスペクトルを再現するためには、自己相互作用補正(SIC)を考慮した第一原理計算が有効であることが明らかとなった。詳細な結果は当日報告する。

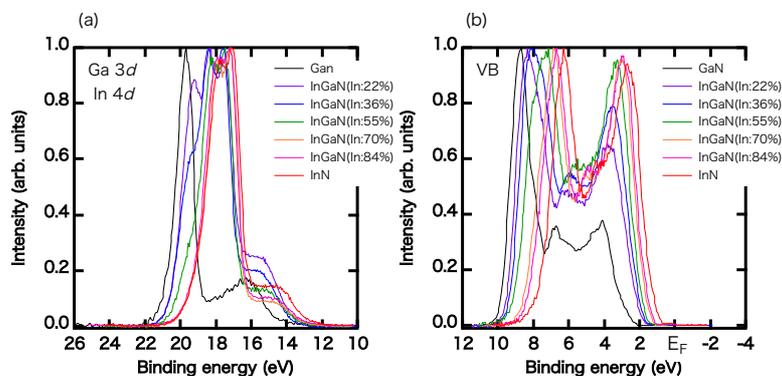


図 1 HX-PES スペクトル (a) Ga 3d, In 4d 内殻準位近傍、(b)VB

謝辞 本研究の一部は、科研費 (No. 19K04501) の支援を受けて実施された。