

# 窒化ガリウムの電子状態の ARPES による評価

## Electronic States of GaN Investigated by ARPES

中河義典<sup>1)</sup>, 向井孝志<sup>1)</sup>, 須田山貴亮<sup>2)</sup>, 間瀬一彦<sup>2)</sup>, 堀場弘司<sup>2)</sup>, 組頭広志<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup>日亜化学, <sup>2)</sup>KEK-PF

窒化ガリウム (GaN) 系化合物半導体は、今日の発光ダイオード (LED) やダイオードレーザー (LD) に代表される固体光源素子の主要構成材料の一つであり、実用化から 22 年余りが過ぎた現在も弛まない研究開発により物性探求や素子機能特性の向上が図られている[1]。

我々は、高エネルギー加速器研究機構の放射光施設 (フォトンファクトリー) の BL-2A と BL-13B において、真空紫外 (VUV) から軟エックス (SX) 線領域の放射光を用いて、角度分解光電子分光法 (ARPES) により GaN 系半導体の電子状態を評価した。ARPES 実験データと第一原理計算に基づく電子帯構造の理論計算からウルツ鉱構造 GaN 結晶の電子帯構造を評価し、その結果をもとに GaN 結晶の光学吸収や発光スペクトル等の光学特性を試算し、半導体発光素子の設計指針となる知見を得るべくフォトルミネセンス (PL) 測定等の実験結果との対比検討を行ったので報告する。

ハライド気相成長法 (HVPE) で作製した GaN 単結晶を所望の結晶方位で切り出したものを試料として用いた。ARPES 測定は、劈開による GaN(11-20)面と(10-10)面、および結晶成長面である(0001)面において実施した。明瞭な電子帯のバンド分散が得られた。図 1 に ARPES により決定した  $\Gamma$ -A 方向のバンド分散と、第一原理計算および強結合近似[2]に基づく理論計算結果との対比を示す。他方位でも実験と理論計算の良い対応が得られた。

GaN の物性や素子特性を特徴づける価電子帯のバンド因子等を試行錯誤解析で ARPES データから求めた。その結果等を用いドナー準位 = 価電子帯間の光学吸収係数や自然放出光スペクトルを、Kane のバンドテイリングモデル[3]と詳細平衡則に基づいて試算した結果を図 2 に示す。また、サファイア基板(0001)面上に有機金属気相成長 (MOCVD) 法で成長した Si 添加 GaN 結晶における室温での PL 測定結果との対比を図 3 に示す。主要な PL ピーク形状と発光ピーク波長の Si 添加濃度依存性等の解析で、実験値と計算値の対応が観られた。

放射光を用いた ARPES は、GaN の電子状態の評価に極めて有効であることが分かった。今後は、低温 ARPES 測定で高分解能計測を実施し、スピン軌道相互作用、結晶場分離エネルギー、非放物線性等のより詳細な価電子帯構造の評価や X 線吸収測定等との組み合わせで伝導帯構造を含めた組成比率や不純物添加依存の情報を取得し、同材料系の物性理解とそれらの素子開発への応用を検討してゆきたい。

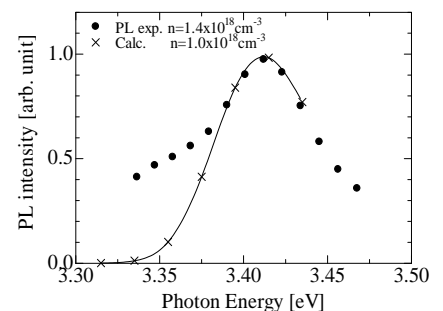
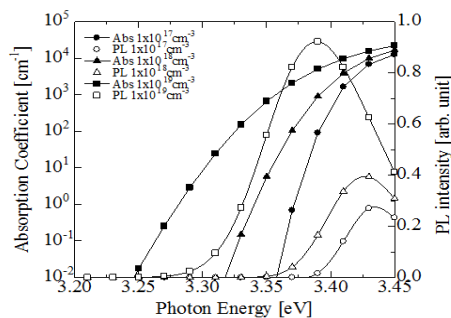
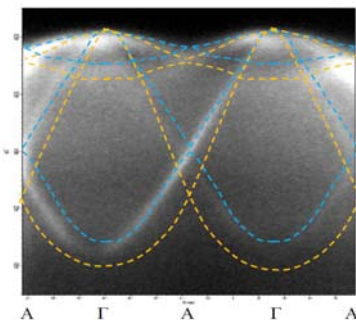


図 1: GaN バンド分散評価

図 2: 吸収係数と自然放出スペクトル

図 3: PL 実験と計算値対比

[1] 小柴正樹, 照明学会誌 94 (2010) 220

[2] T. Yang, S. Nakajima, S. Sakai, Jpn. J. Appl. Phys. 34 (1995) 5912

[3] E. O. Kane, Phys. Rev. 131 (1963) 79