

炭素置換によりホールドーピングした GaN におけるキャリアのアクセプタ準位への無輻射緩和過程

Nonradiative relaxation process of the carriers to acceptor level in hole-doped GaN
by carbon substitution

工学院大¹, 産総研² ◦屋山 巴¹, 宮本 良之²

Kogakuin Univ.¹, AIST², ◦Tomoe Yayama¹, Yoshiyuki Miyamoto²

E-mail: yayama.tomoe@cc.kogakuin.ac.jp

窒化ガリウム(GaN)の p 型化技術の確立は、III 族窒化物半導体のポテンシャルを活かした次世代デバイスの製作において重要な課題である。V 族元素である窒素を、IV 族元素である炭素によって置換することで GaN にホールを導入することが可能である。しかしドーパントである炭素原子は置換型欠陥でもあるため、キャリアの散乱体として量子効率を低下させる要因ともなるジレンマをもたらすことから、必要なキャリア濃度と量子効率の最適化において、電子散乱の影響を定量的に評価することが重要である。欠陥に起因して生じるキャリア散乱を定量的に評価するためには、時間に依存する電子状態変化をあらわに考慮することが必要であることから、本研究では時間依存密度汎関数理論(TDDFT)を用いて電子状態の解析を行った。

GaN ユニットセルを 3x3x2 倍したスーパーセルについて、窒素原子 1 つを炭素原子に置き換えた 72 原子置換モデルを用いて、TDDFT により約 580 フェムト秒のダイナミクスを計算した。格子の初期温度を 750K として乱数により各原子に初速度を与え、実時間の TDDFT 計算と分子動力学計算を同時に実行した。TDDFT の計算には、FPSEID²¹ を用いた。計算の初期条件として価電子帯上端(Fig. 1, 142 番)よりすぐ下にある、2 重縮退した準位(140, 141 番)の電子占有率を下げることで、本来 4 つまで電子が入ることができる状態に 3 つの電子が占有しており、1 つのホールが生じている状態を仮想的に再現した。142~144 番の状態は完全に占有された状態にしている。

Fig. 1 に価電子帯と近傍のアクセプタ準位の固有エネルギー期待値の時間発展を示す。青い線は完全には占有されていない状態を、赤い線は完全に占有された状態を示している。初期状態ではホール準位($t=0\text{fs}$ では青)は励起状態にあり、アクセプタ準位($t=0\text{fs}$ では赤)と有限時間内に準位が交代するようすが確認された。入れ代わりの後、アクセプタ準位が非占有となり、ホールだった波動関数($t=580\text{fs}$ では赤)は占有されたことから、ホールが緩和したことがわかる。このことは、ドーパント自身によるキャリア捕獲の状況がシミュレーションにより再現されたことを示す。今回の計算サイズではドーパント濃度が高い極限ではあるが、本研究における計算テクニックにより原子レベルのダイナミクスを追えることを実証できた。

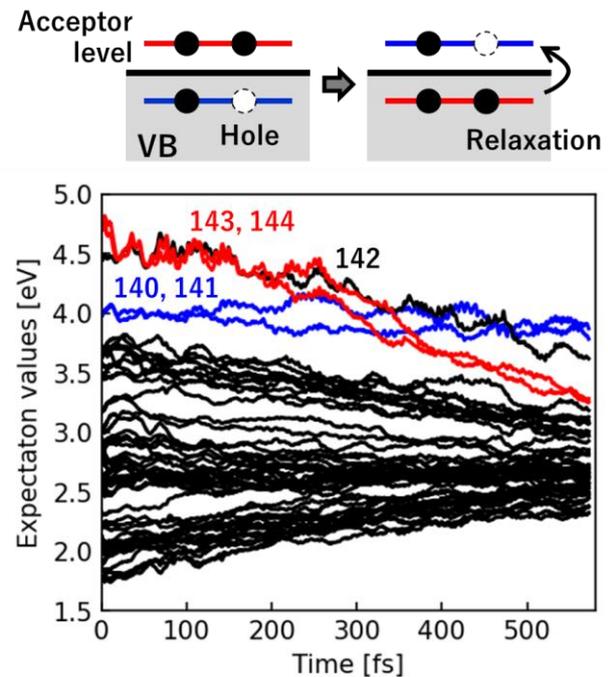


Fig. 1. TDDFT によるアクセプタ準位とホール準位の交代の様子。