

一般セッション(口頭講演) | 15 結晶工学 : 15.4 III-V族窒化物結晶

2025年3月14日(金) 9:00 ~ 11:30 皿 K401 (講義棟)

[14a-K401-1~9] 15.4 III-V族窒化物結晶

市川 修平(阪大)、小田 将人(和歌山大)

◆ 奨励賞エントリー

9:00 ~ 9:15

[14a-K401-1]

n⁺-GaNの電気化学エッチングによるエッチング形態変化の調査

○横井 創吾¹、宇佐美 茂佳¹、今西 正幸¹、隅 智亮²、滝野 淳一²、岡山 芳央²、伊藤 瞭太³、秦 雅彦⁴、田中 敦之⁵、本田 善央⁵、天野 浩⁵、丸山 美帆子¹、吉村 政志⁶、森 勇介¹ (1.阪大工,阪大院工、2.パナソニックホールディングス(株)、3.住友化学(株)、4.伊藤忠プラスチック(株)、5.名大未来研、6.阪大レーザー研)

◆ 奨励賞エントリー

9:15 ~ 9:30

[14a-K401-2]

水素雰囲気異方性熱エッチング(HEATE)法によるGaNストライプ構造の発光特性

○片岡 生一¹、菊池 昭彦^{1,2} (1.上智大理工、2.上智大学半導体研究所)

9:30 ~ 9:45

[14a-K401-3]

有機金属気相エピタキシャル法を用いたAlGaIn:Tb/GaNナノワイヤの成長と光学・構造評価

○館林 潤^{1,2}、吉村 拓真¹、佐藤 和久³、市川 修平^{1,3}、藤原 康文^{4,5} (1.阪大院工、2.QIQB、3.超高压電顕センター、4.阪大産研、5.立命館大)

9:45 ~ 10:00

[14a-K401-4]

GaNナノワイヤ及びGaN系多重量子殻のX線ナノビーム回折におけるCrystal Truncation Rod散乱とこれを用いた構造解析

○宮嶋 孝夫¹、太田 翔也¹、小林 稜汰¹、近藤 剣¹、隅谷 和嗣²、今井 康彦²、木村 滋²、安田 伸広²、中尾 知代³、荒井 重勇³、上山 智¹、今井 大地¹ (1.名城大理工、2.高輝度光科学研究センター、3.名大未来材料システム研)

10:00 ~ 10:15

[14a-K401-5]

青色発光InGaIn/GaNナノピラーの表面再結合とキャリアダイナミクス

小菅 駿也¹、相川 健喜²、倉邊 海史²、菊池 昭彦^{2,3}、○大音 隆男¹ (1.山形大院理工、2.上智大理工、3.上智大半導体研)

10:30 ~ 10:45

[14a-K401-6]

静磁場によるAlNの励起子準位分裂の理論的検討

○池島 拓海¹、石井 良太¹、船戸 充¹、川上 養一¹ (1.京大工)

10:45 ~ 11:00

[14a-K401-7]

ステップおよびキルクを含むAlN(0001)表面での原子の吸着に関する理論解析

○秋山 亨¹、河村 貴宏¹ (1.三重大院工)

◆ 奨励賞エントリー

11:00 ~ 11:15

[14a-K401-8]

窒化ガリウム結晶内部の点欠陥に対するフッ素終端と水素終端の電子状態の比較

○(M1)藤代 裕貴¹、屋山 巴¹、長田 貴弘²、知京 豊裕²、赤城 文子¹ (1.工学院大、2.NIMS)

11:15 ~ 11:30

[14a-K401-9]

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

○屋山 巴¹、宮本 良之² (1.工学院大、2.産総研)

n⁺-GaN の電気化学エッチングによるエッチング形態変化の調査

Research of surface morphology change by electrochemical etching of n⁺-GaN

阪大工, 阪大院工¹, パナソニックホールディングス(株)², 住友化学(株)³,
伊藤忠プラスチック(株)⁴, 名大未来研⁵, 阪大レーザー研⁶,
○(B) 横井創吾¹, 宇佐美茂佳¹, 今西正幸¹, 隅智亮², 滝野淳一², 岡山芳央², 伊藤瞭太³,
秦雅彦⁴, 田中敦之⁵, 本田善央⁵, 天野浩⁵, 丸山美帆子¹, 吉村政志⁶, 森勇介¹
Grad. Sch. of Eng., Osaka Univ.¹, Panasonic Holdings Corp.², Sumitomo Chemical Co., Ltd.³,
Itochu Plastics Inc.⁴, IMASS Nagoya Univ.⁵, ILE, Osaka Univ.⁶,
○S. Yokoi¹, S. Usami¹, M. Imanishi¹, T. Sumi², J. Takino², Y. Okayama², R. Ito³,
M. Hata⁴, A. Tanaka⁵, Y. Honda⁴, H. Amano⁵, M. Maruyama¹, M. Yoshimura⁶, and Y. Mori¹
E-mail: yokoi@cryst.eei.eng.osaka-u.ac.jp

【研究背景】窒化ガリウム(GaN)は電気化学(EC)エッチングで溶解させることが可能であることが報告されており^[1], 半導体プロセスへの応用が期待されている. 一方, GaN の電気化学エッチング特性についての報告の多くはキャリア濃度が $10^{16} \sim 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ の領域にあり^[2], 10^{19} cm^{-3} を超える高濃度にドーピングされた n⁺-GaN に対する印加電圧とエッチング形態に関する報告は少ない. 我々がバルク GaN の作製法として開発を進めているオキサイド気相成長(OVPE)法で育成される GaN 結晶は, III族原料として Ga₂O を使用することから酸素不純物が高濃度で取り込まれ, 10^{20} cm^{-3} を超えるキャリア濃度^[3]となる. 本実験では OVPE-GaN を含む $10^{16} \sim 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ の広範なキャリア濃度の GaN サンプルに対する EC エッチングの印加電圧とエッチング形態のマップデータを取得した.

【実験・結果】キャリア濃度が $10^{16} \sim 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ の GaN 基板に対してオーミック電極を形成した. これらのサンプルを陽極, プラチナ(Pt)電極を陰極として水酸化カリウム 1 mol/L 水溶液中で印加電圧を 3~15 V まで変化させ, +c 面に対して EC エッチングを行った. その後, それぞれ光学顕微鏡及び走査型電子顕微鏡(SEM)を用いて評価を行った.

キャリア濃度 10^{16} cm^{-3} 台のサンプルは今回の実験範囲ではエッチングが観察されなかった. 10^{18} cm^{-3} 台のサンプルは印加電圧の増加に伴って, エッチングなしからポーラスへと変化することが観察された. これら 10^{18} cm^{-3} 以下のサンプルは先行研究^[2]の報告と同様の傾向を示した. 対して 10^{20} cm^{-3} のサンプルは残留が部分的に存在するも, 印加電圧 3 V で全面エッチング(Electropolishing)が進行した. キャリア濃度の増加による全面エッチングへの変化は, 高キャリア濃度 GaN 基板と電解液界面の空乏層幅がより薄くなっている^[4]ことが要因であると推測される. これらの結果は, OVPE-GaN の選択的エッチングが低電圧の領域で可能であることを示唆する.

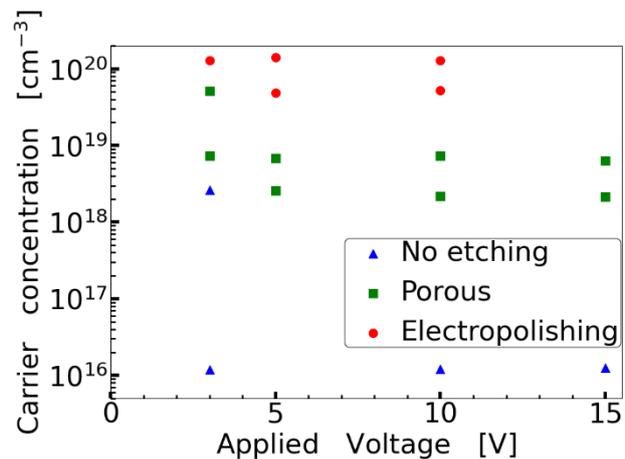


Fig. 1. After etching morphology related to carrier concentration and applied voltage.

【参考文献】

- [1] W. J. Tseng *et al.*, J. Phys. Chem. C, **118**, 29492–29498 (2014).
- [2] Y. Zhang *et al.*, Phys. Status Solidi B **247**, 1713–1716 (2010).
- [3] J. Takino *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **58**, SC1043 (2019).
- [4] D. Chen *et al.*, J. Appl. Phys. **112**, 064303 (2012).

【謝辞】

本研究の一部は環境省「革新的な省 CO2 実現のための部材 (GaN) や素材 (CNF) の社会実装・普及展開加速化事業」の委託及び, JSPS 科研費 JP23H00275 の助成を受けて行われた.

InGaN/GaN MQW ナノストライプ構造の発光特性の構造依存性

Structural dependence of luminescence properties of InGaN/GaN MQW nanostripes

上智大理工¹, 上智大学半導体研究所²
 ○片岡 生一¹, 倉邊 海史¹, 菊池 昭彦^{1,2}

Sophia Univ.¹, Sophia Semiconductor Research Institute²

○Seiichi Kataoka¹, Umuto Kurabe¹, Akihiko Kikuchi^{1,2}

E-mail: kikuchi@sophia.ac.jp

はじめに: 我々は、低損傷ナノ加工技術である水素雰囲気異方性熱エッチング (HEATE)^[1]を提案し、InGaN/GaN系におけるナノピラー/ナノストライプLED^[2]やトポロジカルPhC^[3]、ナノポーラス構造と発光強度増強現象^[4]などについて報告を行ってきた。本研究では、HEATE法で作製したInGaN/GaNナノストライプ構造における発光特性の構造依存性について報告する。

実験: 元ウェハにはp-GaN(60nm)/MQW/n-GaN(50nm)/AlInN(300nm)/GaN(4.8μm)/(0001)Al₂O₃構造で、MQWが4周期のInGaN(2.5nm)/GaN(8nm)のMOCVD成長エビウェハ (Fig.1)を用いた。As grown MQWの室温PLピーク波長は約490nmであった。ウェハ表面に厚さ15nmのSiO₂膜を成膜し、EBLでGa結晶のm軸とa軸に沿って幅(W=)90, 120, …, 300nmの計8種類のストライプアレイ構造を描画した。ストライプ間隔は3W/2とし、各構造の領域は約3μm×3μmとした。また、後工程でAlInN層を選択除去する際にストライプ同士が接合しないように、幅90nmの3本の支持構造をストライプアレイに直交する向きに追加した。この試料を水素圧力18Pa、1000°C、13minの条件下でHEATEを行ってナノストライプアレイ構造 (Fig.2)を作製し、405nmのLD励起による室温PL測定を行った。

結果と考察: Fig.2 (a)に作製したa軸ストライプアレイの上面SEM像の例を示す。(b)と(c)はa軸ストライプの側面(m面)とa軸ストライプの側面であり、どちらも平坦であった。Fig.3は、HEATE後のa軸とm軸ストライプ構造のPLピーク相対強度であり、a軸とm軸のどちらもストライプ幅100~140nmで発光強度が最大となったが、a軸ストライプの発光強度の方が著しく大きいことがわかる。Fig.2(b)と(c)から散乱等の影響は少ないと考えられ、この違いは歪緩和の異方性か側面傾斜角の影響が大きいと推察している。また、面方位によるサイドエッチング量の違いや、三次元FDTDによる光取り出し効率の影響、下部AlInNの選択除去の影響などについても検討を行った。

謝辞: 本研究の一部は、JSPS 科研費JP24K00950の援助を受けて行われた。

参考文献: [1] R. Kita et al. Jpn. J. Appl. Phys. 54 (2015) 046501. [2] K. Ogawa, et al., Phys. Stat. Sol. A 214 (2017) 1600613 [3] 高野 他, 第84回応物秋(2023) 21P-P19-3. [4] 倉邊 他, 第82回応用物理学会秋季学術講演会(2021) 10p-N101-11

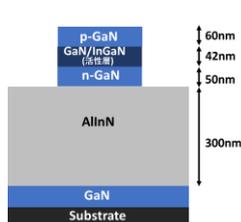


Fig. 1. Cross-sectional diagram of fabricated InGaN/GaN MQW nanostripe structure.

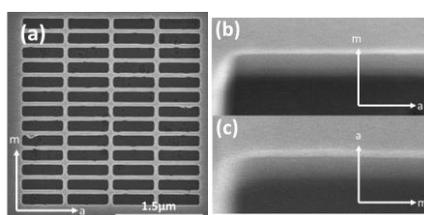


Fig. 2. (a) Top view SEM image of the a-axis stripe array structure (W=100nm), and bird's-eye view SEM images of the side facets of (b) a-axis stripe and (c) m-axis stripe structures. All images are after HEATE process.

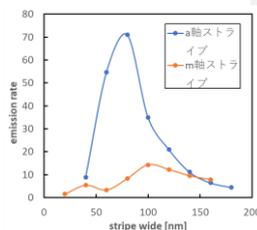


Fig.3. Relative PL peak intensity of InGaN/GaN MQW stripe arrays along the m-axis and a-axis directions after HEATE relative to the as grown wafer.

書式変更: フォント: 10 pt

有機金属気相エピタキシャル法を用いた AlGa_N:Tb/GaN ナノワイヤの成長と光学・構造評価

Formation and optical characteristics of AlGa_N:Tb/GaN core-shell nanowires grown by organometallic vapor phase epitaxy

阪大院工¹, IQIB², 超高压電顕センター³, 産研⁴, 立命館大イントラフォトニクスリサーチセンター⁵

○館林 潤^{1,2}, 吉村 拓真¹, 佐藤 和久³, 市川 修平^{1,3}, 藤原 康文^{4,5}

Grad. Sch. Eng.¹, IQIB², Research Center for UHVEM³, and Sanken⁴, Osaka Univ.,
Intra-Photonics Research Center, Ritsumeikan Univ.⁵

○J. Tatebayashi^{1,2}, T. Yoshimura¹, K. Sato,³ S. Ichikawa^{1,3}, Y. Fujiwara^{4,5}

E-mail: tatebayashi.jun.eng@osaka-u.ac.jp

【はじめに】超スマート社会実現に向けた次世代ディスプレイ技術として、超小型プロジェクトや網膜投影ディスプレイに代表される「マイクロディスプレイ」実現への社会的要素が高まっている。我々は、次世代ディスプレイ実現に向け素子サイズを格段に小型化できるナノワイヤに注目し、有機金属気相エピタキシャル(OMVPE)法により赤色蛍光体である Eu を添加した GaN[1,2] を発光層に有するナノワイヤ成長技術を確認し、室温での電流注入による Eu 発光観測に成功した[3-5]。今回、他の光の三原色である青および緑色を希土類元素で実現すべくテルビウム(Terbium: Tb)に注目し、Tb を添加した AlGa_N(AlGa_N:Tb)をシェル層として GaN コアナノワイヤ上に成長する技術を確認するとともに、Tb 発光特性および構造の評価を行ったのでこれを報告する。

【実験方法】本研究では、(0001)サファイア基板の上に無添加 GaN (ud-GaN)層成長後、円孔を三角格子状に配置した SiO₂ マスクパターンを電子線描画により形成することによりパターンテンプレートを作製した。その後、選択 OMVPE 法によりテンプレート上に ud-GaN コアを形成し、Al 原料流量比を変化させた複数の AlGa_N:Tb 層の成長を行った (Fig. (a))。ナノワイヤ成長後、走査型電子顕微鏡(SEM)や透過電子顕微鏡(TEM)を用いたエネルギー分散型蛍光 X 線分析(EDS)による構造観察および室温フォトルミネッセンス(PL)測定 (YAG 4 倍波レーザー励起(波長 266 nm)) による発光特性評価を行った。側面からの断面構造評価の際、集束イオンビーム装置によりガリウムイオンを[0001]方向から照射しナノワイヤの切出および薄片化 (~100 nm) を行った。

【実験結果】Fig. (b)に今回作製した AlGa_N:Tb/GaN ナノワイヤの SEM 像を示す。頂上部が六角錐で構成される六角柱形状 (平均高さ 900 nm、対角線の長さ 390 nm) のナノワイヤ構造が形成されていることがわかる。作製したナノワイヤ構造の室温 PL 評価の結果 (Fig. (c))、Tb³⁺イオンの ⁵D₄-⁷F_J (J=3,4,5,6)遷移に起因する青・緑・黄および赤色領域の発光が観測されている。また、Al 原料流量比を上げることにより AlGa_N:Tb 層中 AlN モル分率が大きくなる結果、Tb 発光強度は増大している[6]。ここで、広いバックグラウンド発光は主にテンプレートの GaN 中欠陥発光に起因すると考えられる。TEM-EDS による断面構造評価の結果 (Fig. (d))、GaN コアナノワイヤ上に AlGa_N:Tb 層がシェル状に形成されていることがわかる。加えて、EDS 元素マッピングの分析により Al 原料流量比が 50%の時の AlGa_N:Tb 層中 AlN モル分率は約 60%程度と推定される。

【謝辞】本研究は科研費「基盤(B) (No.19H02573, 24K00925)」「特別推進研究 (No.18H05212)」「基盤(A) (No.23H00185)」「基盤(S) (No.23H05449)」、村田学術振興財団、サムコ科学技術振興財団、キャノン財団および池谷科学技術振興財団の支援を受けた。

【参考文献】[1] A. Nishikawa, Y. Fujiwara *et al.*, Appl. Phys. Exp. **2** 071003 (2009). [2] S. Ichikawa, Y. Fujiwara *et al.*, Appl. Phys. Exp. **14** 031008 (2021). [3] T. Otabara, J. Tatebayashi, Y. Fujiwara *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **61**, SD1022 (2022). [4] T. Otabara, J. Tatebayashi, Y. Fujiwara *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **62** SG1018 (2023). [5] J. Tatebayashi *et al.*, ECS J. of Solid State Sci. & Tech. **12** 096003 (2023). [6] R. Komai, Y. Fujiwara *et al.*, J. Appl. Phys. **131** 073102 (2022).

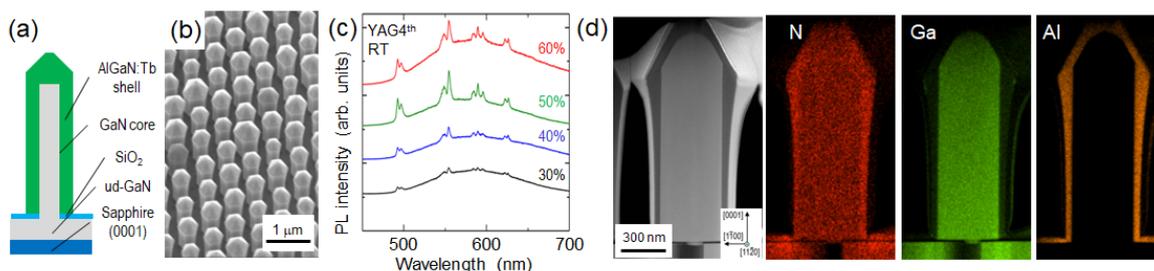


Figure (a) Schematic, (b) SEM image and (c) RT PL spectra of AlGa_N:Tb/GaN core-shell NWs at different TMAI molar flow ratios during the AlGa_N:Tb growth from 30 to 60%. (d) Cross-sectional HAADF scanning TEM image and its EDS elemental mapping of N, Ga and Al of the single AlGa_N:Tb/GaN NW with the TMAI molar flow ratio of 50%.

GaN ナノワイヤ及び GaN 系多重量子殻の X 線ナノビーム回折における Crystal Truncation Rod 散乱とこれを用いた構造解析

Crystal Truncation Rod Scattering in X-ray Nanobeam Diffraction of GaN Nanowires and GaN-based Multi-quantum Shells and its Application to Structural Analysis

名城大理工¹, 高輝度光科学研究センター², 名大未来材料・システム研³

○宮嶋 孝夫¹, 太田 翔也¹, 小林 稜汰¹, 近藤 剣¹, 隅谷 和嗣², 今井 康彦²,
木村 滋², 安田 伸広², 中尾 知代³, 荒井 重勇³, 上山 智¹, 今井 大地¹

Meijo Univ.¹, JASRI², Nagoya Univ.³

°T. Miyajima¹, S. Ota¹, R. Kobayash¹, T. Kondo¹, K. Sumitani², Y. Imai²,
S. Kimura², N. Yasuda², T. Nakao³, S. Arai³, S. Kamiyama¹, and D. Imai¹

E-mail: mtakao@meijo-u.ac.jp

【背景】我々は、GaN 系高出力半導体レーザーの活性層として期待されている GaN 系多重量子殻 (Multi-quantum Shells, MQS) の非破壊構造解析が、大型放射光施設 SPring-8 の X 線ナノビーム回折により可能であることを報告してきた[1-3]。GaN 系 MQS は、直径数百 nm・高さ数 μm の六角柱状の GaN ナノワイヤ (Nanowire, NW) の側面である m 面上に成長した $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}/\text{GaN}$ 多重量子井戸であり、デバイス性能の向上にはその構造最適化が必要である。しかしながら、このような nm サイズの構造解析を市販の X 線回折装置で行うことは難しかった。

実際に、GaN NW や GaN 系 MQS の側面に X 線ナノビームを照射すると、その逆格子マップには、非常に明瞭な Crystal Truncation Rod (CTR) 散乱が観測されることが分かった。本講演では、ここで観察される CTR 散乱の特徴と、これを用いた構造解析を報告する。

【実験方法】測定試料として、MOCVD 法により成長した GaN NW と GaN 系 MQS を用意した。GaN NW は、c 面 GaN 層上に、 SiO_2 マスクを使った横方向成長により形成した。その形状は六角柱であり、間隔は 1000-1600 nm。GaN 系 MQS は、GaN NW の側壁である m 面を覆うように $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}/\text{GaN}$ 多重量子井戸を成長することで形成された。X 線回折測定は SPring-8 のビームライン BL13XU と BL40XU にて行った。

Fig.1 のように、BL13XU では、基板を劈開後、林立した MQS の 1 つの m 面に X 線ナノビームを照射。BL40XU では、単一の MQS を FIB マイクロサンプリング法により抽出し、その m 面に X 線ナノビームを照射した。

【結果】Fig.2 に、1000nm 間隔で林立した GaN NW から得られた逆格子マップを示した。最大強度を有する GaN の $1\bar{1}00$ 回折とともに、これを中心にして 6 方向に長く伸びる信号が明瞭に観察された。これが CTR 散乱であり、結晶の電子密度が NW の 3 つの側面で終端されることで生じていると考えられる。また、試料が GaN 系 MQS の場合は、同様な CTR 散乱に量子井戸のサテライトピークが重畳するため、3 つの側面における量子井戸の構造解析が可能になった。

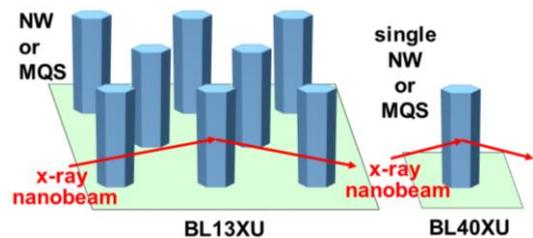


Fig.1 : Schematic diagrams of the samples measured at the beamlines of BL13XU and BL40XU.

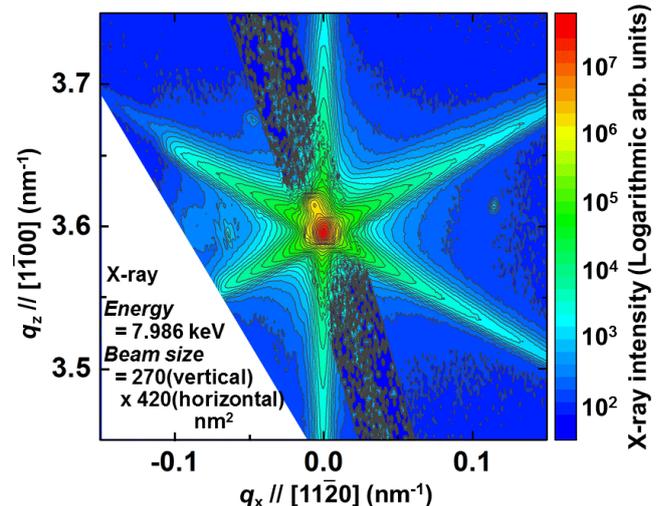


Fig.2: $1\bar{1}00$ reciprocal lattice map from GaN NWs.

謝辞 名城大の岩谷素顕教授、竹内哲也教授、赤崎勇教授に感謝致します。また本研究の一部は国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の助成事業、文部科学省委託事業ナノテクノロジープラットフォーム課題として名古屋大学微細構造解析プラットフォームの支援(課題番号: JPMXP1221NU0052)により実施した。放射光実験は、高輝度光科学研究センター(JASRI)の承認を得て、SPring-8 の BL40XU 及び BL13XU で実施された(課題番号: 2021B1563, 2019B1517, 2021A1507)。

参考文献 [1] R. Seiki *et al.*, ICNS12, B 1.60, Strasbourg (2017).

[2] T. Kondo *et al.*, IWN2018, J7-3, Kanazawa (2018). [3] T. Miyajima *et al.*, IWN2024, 456, Hawaii (2024).

青色発光 InGaN/GaN ナノピラーの表面再結合とキャリアダイナミクス

Surface recombination and carrier dynamics in blue-emitting InGaN/GaN nanopillars

山形大院理工¹ 上智大理工² 上智大半導体研³

小菅 駿也¹, 相川 健喜², 倉邊 海史², 菊池 昭彦^{2,3,*}, 大音 隆男^{1,*}

Yamagata Univ.¹, Sophia Univ.², Sophia Semicon.³,

S. Kosuge¹, T. Aikawa², U. Kurabe², A. Kikuchi^{2,3,*}, and T. Oto^{1,*}

E-mail: * kikuchi@sophia.ac.jp, ** t-oto@yz.yamagata-u.ac.jp

マイクロ LED ディスプレイの材料として InGaN が注目されているが、長波長領域での発光効率低下が課題である。InGaN にナノ構造を導入することでナノ構造効果が得られて発光効率の増大に寄与するが、表面物性が発光特性に与える影響の理解がデバイス性能向上に向けて重要である。本研究では、膜状の青色 In_{0.15}Ga_{0.85}N/GaN 量子井戸に水素雰囲気異方性熱エッチング(HEATE)法[1]で選択エッチングを施して、直径 D の異なる三角格子配列ナノピラー構造を系統的に作製した。InGaN ナノピラーの PL 強度の時間発展を測定して、ポテンシャル揺らぎを反映したストレッチド指数関数(以下、指数関数)を用いたフィッティングにより再結合確率 τ_{PL}^{-1} を導出し、表面再結合がキャリアダイナミクスに与える影響を評価した。

図 1 に 10 ns までの PL 減衰曲線から得られた表面再結合確率 τ_{surf}^{-1} の D^{-1} 依存性を示す。 τ_{PL}^{-1} から τ_{surf}^{-1} を分離する方法は過去の報告を参照されたい[2]。 $D > \sim 200$ nm では τ_{surf}^{-1} が D^{-1} に比例する一方で、 $D < \sim 200$ nm ではキャリアの拡散距離 L_d が D の値と同程度かそれ以下となり、表面再結合の飽和現象が観測された。キャリア拡散を考慮した再結合過程を議論するため、図 2 にメサとナノピラーにおける 25 ns までの PL 減衰曲線を示す。なお、破線は単一指数関数でのフィッティング結果である。 $D = 100$ nm では単一の指数関数で再現できず、2つの減衰成分があることが明らかになった(黒実線参照)。 $D \gg L_d$ では τ_{surf}^{-1} の影響を無視でき、 $D \ll L_d$ ではすべてのキャリアがコラム側面まで到達できるため、1成分で再現できたと考えられる。一方、 $D \sim L_d$ ではピラーの中心付近で発生したキャリアは表面再結合の影響を受けないため、二つの減衰過程が空間的に分離されたと考えられる。これらの結果は、表面再結合の飽和現象を支持する結果である。

謝辞：本研究の一部は、TI-FRIS, JSPS 科研費(#21K14483)の支援を受けて行なわれた。

[1] R. Kita, ..., A. Kikuchi, Jpn. J. Appl. Phys. **111**, 133110 (2017).

[2] 大音, ..., 菊池, 信学技報 **124** (280), 9-12 (2024).

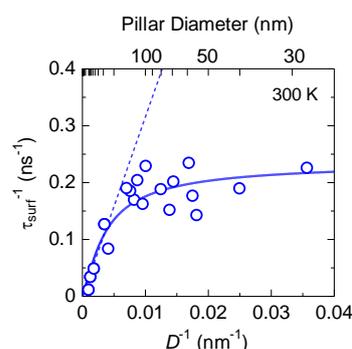


Fig. 1: D^{-1} dependence of the τ_{surf}^{-1} value in blue InGaN/GaN nanopillars.

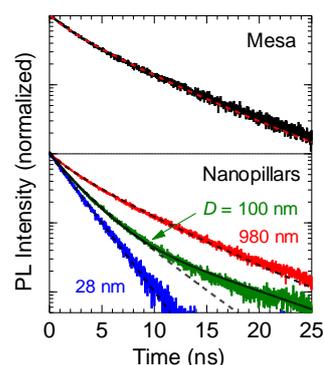


Fig. 2: PL decay curves of blue InGaN/GaN mesa and nanopillars.

静磁場による AlN の励起子準位分裂の理論的検討

Theoretical investigation on exciton energy level splitting in AlN under static magnetic field

京大工, °池島 拓海, 石井 良太, 船戸 充, 川上 養一

Kyoto Univ., °T. Ikeshima, R. Ishii, M. Funato, and Y. Kawakami

E-mail: ikeshima.takumi.57y@st.kyoto-u.ac.jp

1. はじめに

AlN とその混晶の AlGaIn は固体深紫外光源や高耐圧パワーデバイスの実現に有望な材料として注目されている。しかしながら、AlN の物性には未解明な点が多く、特に励起子微細構造をめぐる論争は 10 年以上にわたり続いている。当研究室では正の電子正孔交換相互作用定数を提唱している[1]。一方、Feneberg らは負の交換相互作用定数を報告している[2]。先行研究では主に偏光の観点からこの定数の符号について調べられてきたが統一見解をもたらすには至っていない。

電子状態・励起子状態の解明には応力や磁場といった摂動下における分光法が有効である。そこで本研究では応力や磁場の導入に伴う励起子準位の変化について理論的に考察した。

2. 解析結果

不変量の理論によって構築された励起子有効ハミルトニアンを用いて解析を行った。不変量の理論とは、 Γ 点におけるハミルトニアンが系の結晶点群のあらゆる対称操作に対して不変であるという性質を用いて素励起子のハミルトニアンを構築する理論である[3]。応力の効果については、計算に必要な物性定数である変形ポテンシャルが先行研究で同定されている[4]。数値計算によって得られた励起子準位の軸性応力依存性を図 1(a)と(b)に示す。実験で印加できる程度の応力を導入しても励起子準位の分裂は生じないため、相互作用定数の符号について議論できないことが分かる。一方、磁場の効果についてはその程度を調べた先行研究がないため、物性定数である g 因子を典型的な 2 と仮定して計算した。得られた励起子準位の磁場依存性を図 2(a)と(b)に示す。磁場を導入すると準位の分裂が生じるため、交換相互作用定数の符号について議論できる可能性のあることが分かる。

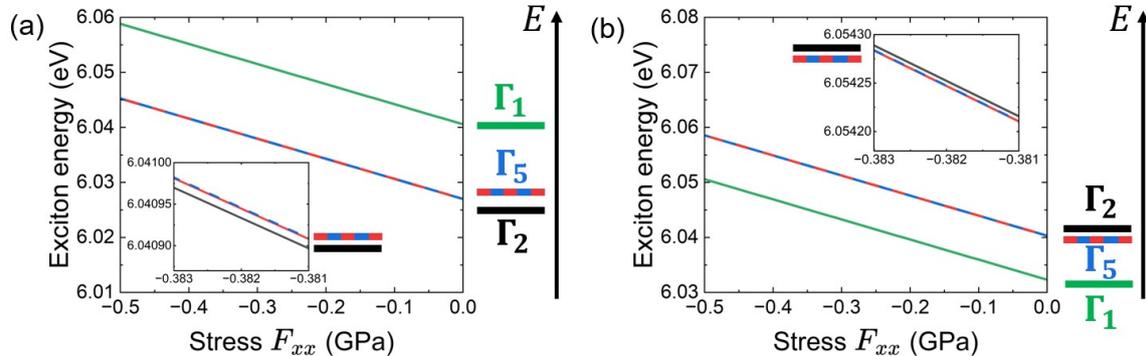


Fig. 1 Uniaxial stress dependence of the exciton energy levels with (a) $j = 6.8$ meV and (b) $j = -4.0$ meV. Γ_1 (green) and Γ_2 (black) are not degenerated whereas Γ_5 (blue and red) is doubly degenerated.

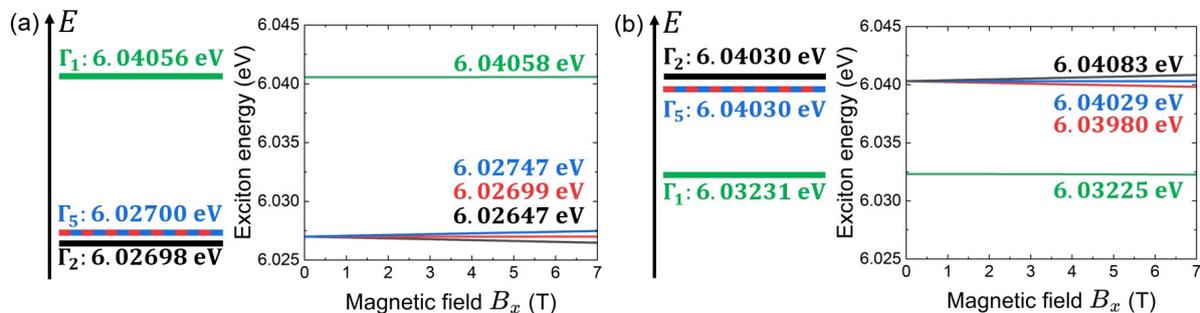


Fig. 2 Magnetic field dependence of the exciton energy levels with (a) $j = 6.8$ meV and (b) $j = -4.0$ meV. The exciton energies at 7 T are written in the figure.

参考文献

- [1] R. Ishii *et al.*, PRB **87**, 161204(R) (2013). [2] M. Feneberg *et al.*, APL **102**, 052112 (2013). [3] K. Cho, PRB **14**, 4463 (1976). [4] R. Ishii *et al.*, PRB **87**, 235201 (2013).

ステップおよびキンクを含む AlN(0001)表面での原子の吸着に関する理論解析

Theoretical study for adsorption behavior of various types of adatoms on AlN(0001) surface with steps and kinks

三重大院工、○秋山亨, 河村貴宏

Mie Univ., ○Toru Akiyama, Takahiro Kawamura

E-mail: akiyama@phen.mie-u.ac.jp

【はじめに】 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 界面においては混晶組成が緩やかに変化し急峻性が劣化する現象(組成引き込み)が起こり、混晶組成の制御が重要な課題となっている[1]。近年、 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ における組成引き込みが歪みに起因するのではなく表面モフォロジーに依存したGa原子の取り込みに起因することが提案されており[2]、ステップでのAlおよびGa原子の表面での振る舞いの違いを明らかにすることはこの現象を理解するうえで重要な知見となることが期待される。また、不純物の取り込みに関しても表面に出現するステップやキンクによる影響も考えられる[3]。これまでに我々は、ステップおよびキンクを含むAlN(0001)表面を考慮して、表面構造安定性および吸着・脱離の挙動を第一原理計算によって解析することでステップフロー成長におけるキンクの影響を検討してきた[4, 5]。本研究では、原子種として様々な元素を考慮して、平坦面およびステップとキンクを含むAlN(0001)表面での吸着の挙動におけるステップおよびキンクの影響を検討する。平坦面は(2×2)周期スラブモデルを、ステップとキンクを含む表面は($\sqrt{61} \times \sqrt{21}$)周期スラブモデルを用いて模し、第一原理計算によって得られる全エネルギーより吸着エネルギーを計算する。

【結果および考察】

Table 1 は、各原子種における平坦面、ステップ端およびキンクにおける吸着エネルギーを示したものである。Al 原子においては平坦面に比べてステップ端およびキンクにおける吸着エネルギーが低くなるのに対して、N 原子においては平坦面における吸着エネルギー

Table 1. Calculated adsorption energies (in eV) of C, N, O, Mg, Al, and Ga adatoms on flat AlN(0001) surface, and vicinal AlN(0001) surface with and without kinks. Data in Refs. 4 and 5 are used for Al and N adatoms. The reconstruction consisting of H-terminated N atoms and Al-H bonds ($\text{N}_{\text{ad}}\text{-H}+\text{Al-H}$) in Ref. 5 is considered.

Species	Flat surface	Step edge w/o kinks	Step edge with kinks
C	-5.17	-5.59	-5.12
N	-4.17	-3.06	-1.84
O	-6.89	-3.13	-3.60
Mg	-0.37	-1.80	-3.53
Al	-2.03	-3.93	-3.82
Ga	-1.31	-2.37	-3.40

が低く、それぞれ表面での吸着の挙動が異なることが示唆される。すなわち、Al 原子はステップ端に取り込まれやすいのに対して N 原子はテラスに優先的に吸着することが考えられる。Al 原子と同じ III 族元素である Ga 原子および II 族元素である Mg 原子は Al 原子と同様の傾向を示し、ステップ端およびキンクでの吸着エネルギーが低くなる。しかしながら、吸着する際に結合する N 原子との結合(Mg-N および Ga-N ボンド)の強さに起因して、その吸着エネルギーは Al 原子のそれ(Al-N ボンド)とは異なっており、これらの元素は取り込まれ難い傾向がみられる。また VI 族元素である O 原子は、V 族元素である N 原子と同様の傾向を示し平坦面における吸着エネルギーが低くなり、テラスに優先的に吸着することが考えられる。一方、IV 族元素である C 原子においては、表面の形態に依存せず、いずれの箇所においても吸着し得ることが解る。これら原子種に依存した吸着の挙動の違いは、ステップフロー成長における不純物の取込みおよび組成変調を理解するうえで重要となることを示唆している。

【参考文献】 [1] B. Liu *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **98**, 261916 (2011). [2] J. H. Dycus *et al.* *Appl. Phys. Lett.* **114**, 031602 (2019). [3] T. Akiyama *et al.*, *Phys. Status Solidi B* **261**, 2300573 (2024). [4] T. Akiyama *et al.*, *J. Cryst. Growth* **571**, 126244 (2021). [5] T. Akiyama *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.* **63**, 02SP71 (2024).

窒化ガリウム結晶内部の点欠陥に対する フッ素終端と水素終端の電子状態の比較

Comparison of electronic states of fluorine and hydrogen termination of a point defect inside gallium nitride crystals

工学院大学¹, NIMS² ◯(M1) 藤代裕貴¹, 屋山巴¹, 長田貴弘², 知京豊裕², 赤城文字¹

Kogakuin Univ.¹, NIMS², ◯Yuki Fujishiro¹, Tomoe Yayama¹, Takahiro Nagata², Toyohiro Chikyow², Fumiko Akagi²
E-mail: cm24041@ns.kogakuin.ac.jp

1. 研究背景と目的

窒化ガリウム(GaN)はキャリア移動度や絶縁破壊強度に優れた半導体であり、GaN-HEMT(High Electron Mobility Transistor)等の電子デバイスへの利用が進んでいる。しかし、GaNを用いたデバイスではGaN結晶中の欠陥に起因する性能の低下が問題となっている。Si結晶では、水素雰囲気下で高温アニールすることで欠陥を水素で終端し不活化しつつ、結晶性を回復する手法が確立されている[1]。これに対して、GaNでは結晶性を回復するためにより高いアニール温度が必要であるため、より安定な終端元素として、電気陰性度の大きいフッ素による窒素欠陥の終端の可能性を検討してきた[2]。本発表では、GaN結晶内部の窒素空孔をフッ素および水素で終端した場合の電子状態を第一原理計算により解析、比較した結果について報告する。

2. 計算方法

欠陥のないGaNモデル(defect-free)、窒素空孔のあるモデル(defect)、欠陥をフッ素で終端したフッ素終端モデル、欠陥を水素で終端した水素終端モデルについて、状態密度分布、バンド構造及び電荷密度分布を密度汎関数理論に基づく第一原理計算を用いて解析した。すべてのモデルについて構造最適化を行った。交換相関汎関数はPBE-GGA汎関数を使用し、カットオフエネルギー 800 eV、k点数 $4 \times 4 \times 4$ 、電子密度収束条件は 1.0×10^{-5} eV、周期境界条件のもとで計算を行った。

3. 計算結果

Fig 1 に各モデルにおける Ga 原子の部分状態密度(PDOS)と全状態密度(黒線)を示す。PDOSは欠陥モデルまたはそれを終端したモデルの欠陥に隣接する4個のGa原子それぞれについて示した。すべての図では各モデルの最高被占準位を0 eVとし、価電子帯、伝導帯の状態密度の位置を揃えて表示している。(a)のdefect-freeモデルでは、energy = 0 eV付近の価電子帯上端近傍と、2 eV付近の伝導帯下端近傍には状態密度のピークはみられないことがわかる。(b)のdefectでは価電子帯、伝導帯それぞれのバンド端近傍に(a)ではみられない状態密度のピークがみられ、これらは窒素空孔に起因する欠陥準位であると考えられる。一方で(c)のフッ素終端モデルでは、defect-freeモデルと同様にバンド端近傍に状態密度のピークはみられないことがわかった。これに対して、(d)の水素終端では、defectモデルと同様にバンド端近傍の1 eV付近及び-0.5 eV付近に(a)ではみられない状態密度が確認できる。以上の結果より、フッ素終端では窒素空孔に起因する欠陥準位をバンド端近傍から除去できるのに対して水素終端では除去できないことがわかった。電荷密度分布よりフッ素および水素原子と欠陥に隣接するGa原子の間にはいずれも結合が生じていることが示されている。このため、水素終端モデルでみられるピークは欠陥準位ではなく、結合により生じた結合性・反結合性軌道のエネルギー準位であると考えられる。この結合により生じる2つの準位のエネルギー差が水素終端と比べてフッ素終端は大きいために、バンド端近傍にピークがみられずGaN結晶本来のバンド端近傍の電子状態となることが示された。

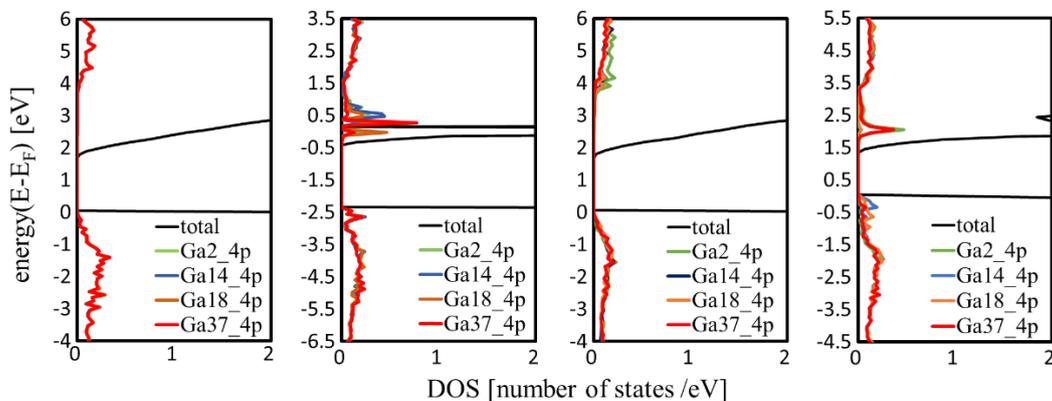


Fig 1. PDOSs of Ga atoms for (a) defect-free, (b) defect, (c) fluorine terminated, (d) hydrogen terminated models

[1] 高萩 隆行, 真空, 33 巻 11 号, 854 (1990).

[2] Y. Fujishiro, et al., The 71st JSAP Spring Meeting 2024, Poster, 25a-P03-10 (2024).

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($t=0$ fs では青)は励起状態にあり、アクセプタ準位($t=0$ 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($t=580$ 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。

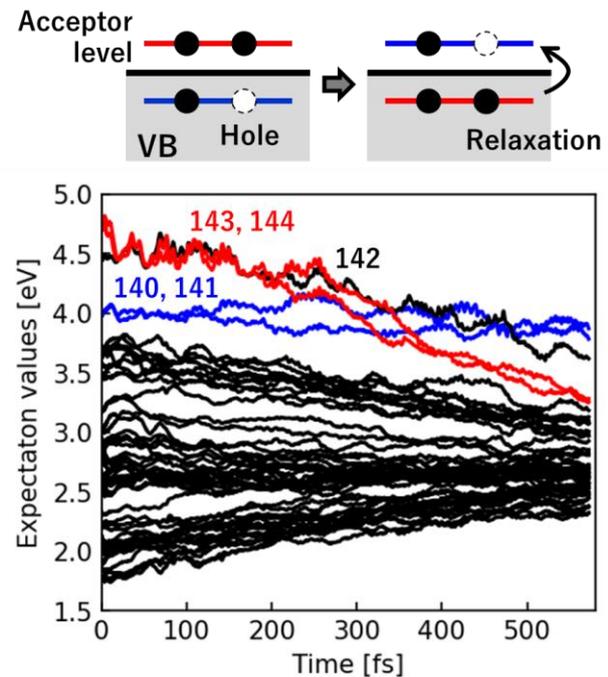


Fig. 1. TDDFT によるアクセプタ準位とホール準位の交代の様子。