

## GaN中の欠陥における格子変位が引き起こす電子状態変化の第一原理計算

First-principles calculation on electronic structure changes by lattice distortions at a defect in GaN

○辻尾健志、小田将人、篠塚雄三 (和歌山大院シス工)

○T. Tsujio, M. Oda, and Y. Shinozuka (Wakayama Univ.)

E-mail: s153031@center.wakayama-u.ac.jp

**【目的】** 半導体レーザー (LD) や発光ダイオード (LED) などの半導体発光素子において、非発光過程は低発光効率の原因となり、その機構解明は長年の課題である[1]。そのうち、バンドギャップ中の局在電子準位を介してキャリアがフォノンを放出することで非発光再結合する過程は、欠陥増殖反応などを誘起するため素子劣化の原因ともなり、その解明が待たれている。この多フォノン放出非発光再結合過程に対して、我々は以前、欠陥準位を介してのエネルギー転換のシミュレーション計算を行った[2]。その結果、あるキャリア捕獲により誘起される過渡的な格子振動が次のキャリア捕獲を活性化し、キャリア濃度や電子準位の位置によっては正のフィードバックが生じ、その結果、大きな格子変位=欠陥反応 (フォノンキック機構) が引き起こされる可能性を示した。どのような局在準位が、単純な非発光中心 (killer center) となるか、あるいはカタストロフ的な欠陥反応の核となるかは、局在準位のgap中の位置と格子振動との結合の強さ、coupleする格子振動モードの性質に依存する。本研究ではGaN中の空格子を例にとり、電子状態とフォノンモードを計算し、局在電子状態がどの程度、近傍の格子変位に依存するかを明らかにする。

**【モデル】** 図1に示すように GaN の単位胞の各辺を2倍にした(2×2×2) モデルを作成し、黒丸で囲んだ Ga 原子を空孔欠陥に置換した。この構造での電子状態とフォノン状態密度を計算するため、密度汎関数法に基づく第一原理計算を行った。

**【計算結果】** Ga 空格子を含むGaN (2×2×2) における、全電子状態密度は図2 のようになり、欠陥準位は価電子帯の直上に位置する浅い準位になることが分かった。浅い準位の場合、キャリアの捕獲はしやすいが、先行研究 [2] によると、次の2点为非発光再結合中心となるかどうかを分けるチェックポイントとなる。

- 1) 格子振動との相互作用が強く、キャリア捕獲後に大きな格子緩和が生じるかどうか、
- 2) 関与するフォノンの振動数分散の大きさ: 分散が小さいほど格子緩和の時定数が長くなり、次のキャリアの捕獲の確率が非熱的に増大し、フォノンキック機構が起りやすくなる。

そこで、本研究では、空孔欠陥を導入したGaN (2×2×2) において、上記2点に関して詳しく解析した。

[1] O. Ueda, Jpn. J. Appl. Phys. **49** (2010) 090001 (Review), 上田 修, 応用物理 **78** (2009) 316.

[2] Y. Shinozuka, M. Wakita, and K. Suzuki, Jpn. J. Appl. Phys. **51** (2012) 11PC03.

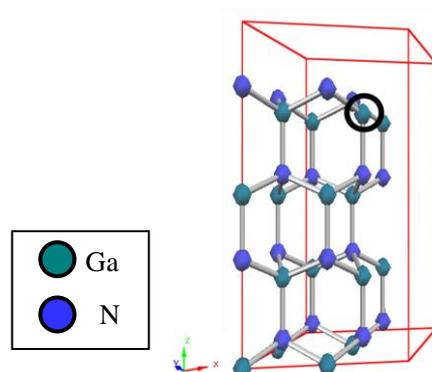


図1 GaN (2×2×2) 中の Ga 空孔モデル

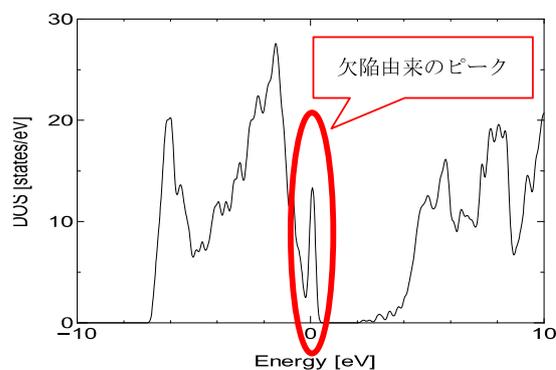


図2 Ga 欠陥を挿入した場合の GaN (2×2×2) の全電子状態密度 (0 eV: フェルミ準位)