

GaN における励起子・励起子分子準位間遷移過程の理論計算

Numerical simulation of exciton and biexciton dynamics for GaN

千葉大工, °(M1) 野町健太郎, 岩堀友洋, 大木健輔, 馬ペイ, 森田健, 石谷善博

Chiba Univ. °Kentarō Nomachi, Kensuke Oki, Bei Ma, Ken Morita, and Yoshihiro Ishitani

E-mail: ishitani@faculty.chiba-u.jp

励起子及び励起子分子は高い輻射再結合確率を持つため、窒化物半導体などワイドギャップ半導体において注目されている。GaN のフォトルミネッセンス測定では室温での励起子発光が確認されているものの¹、レーザ素子の閾値直下の動作条件では 150 K 以上において励起が解離しているとの報告がある²。またパルス励起により生成された励起子では非熱平衡状態が数百 ps 続くことが分かっているが、励起子分子の生成・消滅のダイナミクスは明らかになっていない。我々は、励起子-励起子分子系の非熱平衡状態におけるダイナミクスの理論計算を行うことにより励起子分子の安定性評価を進めている。本研究では、バルク GaN の励起子及び励起子分子における励起、脱励起のダイナミクスのシミュレーションを電子衝突、フォノンの吸放出、光学遷移を考慮して行った。電子衝突過程では水素プラズマ系での状態遷移確率を基に GaN の物性値を取り入れ、フォノン過程ではフレリッヒ、変形ポテンシャル及びピエゾ電気の各相互作用を考慮してダイナミクス計算を行った。励起子主量子数は 5 つ取り入れ、これらの励起状態、自由電子及び励起子分子の基底準位と励起準位のそれぞれのポピュレーションに関するレート方程式をたて、定常解を求めた。電子温度 T_e 、励起子温度 T_x 及び格子温度 T_l をそれぞれ独立に設定して非熱平衡状態の考察を行った。状態遷移概要図を Fig.1 に示す。

計算の結果、励起子及び励起子分子の脱励起には電子温度や励起子温度に比べて格子温度が大きく影響することが分かった。主量子数 $p=1$ における励起子のポピュレーションは格子温度が 100 K 程度から大きく減少してゆくことが分かった。これは主量子数 $p=1$ から $p=2$ へ励起し、それ以上の準位で連続的なはしご状励起になっていることが原因であると考えられる。この励起子の脱励起は励起子分子の減少にも影響している。Fig2 に示すように、 $T_l=10, 100, 300$ [K] と変化させたときの励起子分子のポピュレーションは格子温度の上昇に対して減少している。 T_l が大きくなるにつれ励起子分子解離確率が大きくなると同時に、 $T_l=100$ K 以上では $1s$ 状態の励起子のポピュレーションが減少するため³ $T_l=300$ K では励起子分子のポピュレーションが減少していると考えられる。

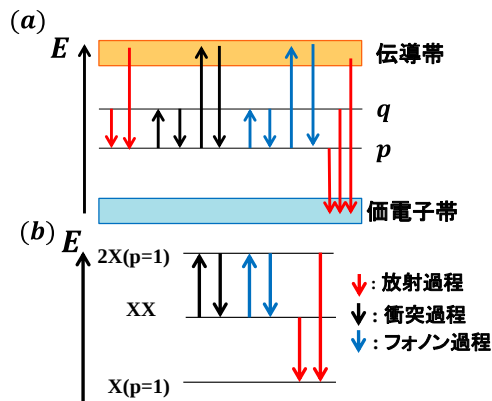


Fig.1 励起子(a)及び励起子分子(b)の状態遷移概要図。X は励起子、XX は励起子分子を表している。

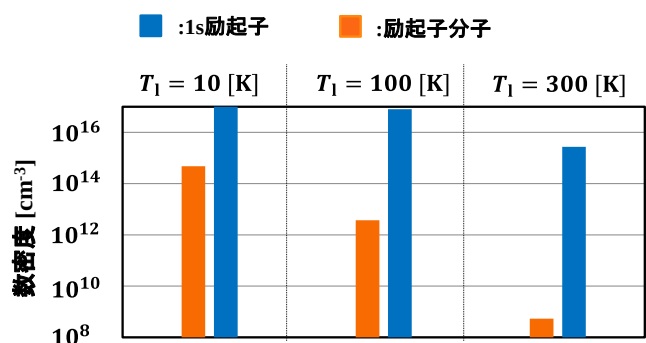


Fig.2 1s 励起子と励起子分子の励起密度及び格子温度によるポピュレーション変化。 T_e および T_x は 10 K で計算している。

参考文献

- 1) S. F. Chichibu, T. Asuhara, T. Sota, S. Nakamura, J. Appl. Phys. 79, 2784 (1996).
- 2) S. Bidnyk, T. J. Schmidt, B. D. Little, J. J. Song, Appl. Phys. Lett. 74, 1 (1999).
- 3) T. Iwahori, Y. Ishitani *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. 55, 05FM06 (2016).