GaN における励起子及び自由キャリアの密度とレート係数の理論計算

Theoretical Calculation of Rate Coefficients and Densities of Excitons and Free Carriers in GaN

千葉大院工　°大木 健輔，野町 健太郎，馬 蓓，森田 健，石谷 善博

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

E-mail: okiken@chiba-u.jp

GaN、AlN、ZnO 等では励起子の束縛エネルギーが室温と同程度以上に高く、励起子が材料の光学特性に大きな影響を与える。GaN のレーザデバイスでは 150K 以上で励起子による発振がなくなることが観測されている[1]が、その詳細なメカニズムは明らかになっていない。種々の条件下における光学的デバイスの解析、開発のためには、励起子や自由キャリア等の各状態のダイナミクスを記述する理論体系が必要である。各状態の密度の定常解や時間発展を記述するレート方程式のモデルが広く使われているが、各状態間の遷移確率を表すレート係数の値の詳細な計算はこれまでほとんど行われてこなかった。

本研究では、各密度のダイナミクスの理論体系の構築を目指し、バルクの GaN における、主量子数 n が 5 までの励起子と自由キャリアのレート係数を理論的に詳細に計算した。輻射・電子衝突遷移のレート係数の計算には水素プラズマモデルを利用し、フォノン吸放出による遷移のレート係数はフェルミの黄金律から厳密に計算した。Fig. 1 はレート方程式の定常解である各ポピュレーション密度の温度依存性である。温度が上がる程、1s 励起子の密度 $N_X(1)$に対する上準位の密度(n が 2 以上の励起子密度 $N_X(n)$と自由電子密度 N_e)の比 r_u が上がる。r_u が上がる程、1s 励起子の定常状態からの減衰時間τ_d が再結合時間τ_{rec}(単位時間当たりの再結合確率の逆数)に比べて上がっていき、τ_d/τ_{rec} が 10 以上にもなる(Fig. 2)。これらのτ_d とτ_{rec} の値を同じとみなしている実験研究が多いが、特に室温付近の場合等ではそれらは一致しないと考えられる。

[1] S. Bidnyk, *et. al*, Appl. Phys. Lett. **74**, 1 (1999).

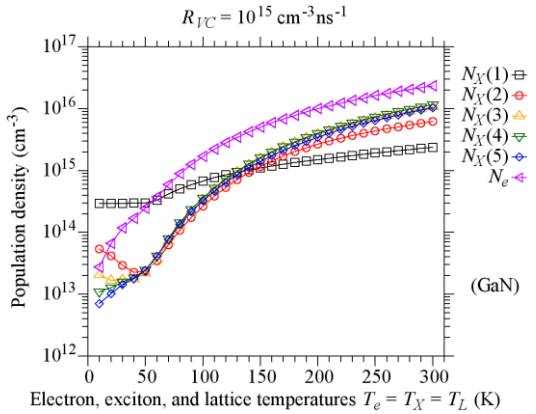

Fig. 1. Dependence of the population densities on temperature. R_{VC} is the excitation rate from the valence to conduction band.

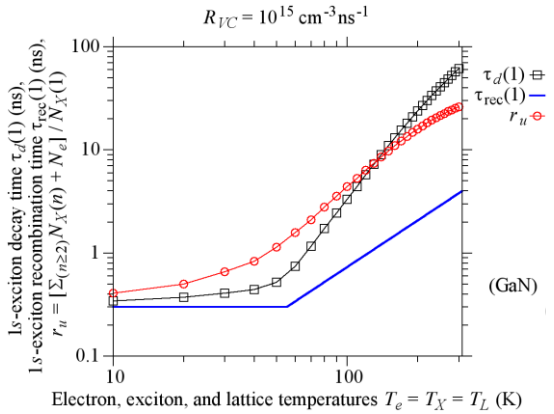

Fig. 2. Dependence of 1s-exiciton decay time and recombination time on temperature.