GaN 中の点欠陥が光学特性に与える影響の解明

Effect of point defects on optical properties of GaN

三重大院工 [1]，阪大院工 [2] ○(M2)大畑 智嗣 [1]，河村 貴宏 [1,2]，今西 正幸 [2]，吉村 政志 [2]，森 勇介 [2]

Mie Univ. [1], Osaka Univ. [2], ◦Satoshi Ohata[1], Takahiro Kawamura[1,2], Masayuki Imanishi[2], Masashi Yoshimura[2], Yusuke Mori[2]

E-mail: 420M111@m.mie-u.ac.jp

はじめに　GaN はバンドギャップが約 3.4 eV と大きく，本来は無色透明の結晶である．しかし，アモノサーマル法や Oxide Vapor Phase Epitaxy（OVPE）法[1]によって成長した GaN 結晶は多くの欠陥や不純物を含んでおり，その影響が結晶の着色に現れる．結晶品質の改善や特性の制御には欠陥制御技術の向上が不可欠であるが，そのためには欠陥が材料特性に与える影響を理解することが重要である．そこで本研究では第一原理計算を用いて点欠陥と複合欠陥を含む GaN の電子構造を解析し，欠陥が GaN の光学特性に与える影響を調べた．

計算方法　計算には第一原理計算パッケージ Quantum ESPRESSO[2]を使用した。まず，基準となる GaN 完全結晶の構造最適化および状態密度（DOS）計算を行った．次に，欠陥を含む構造の場合，格子ベクトルは GaN 完全結晶と同じ値で固定して原子座標のみ最適化した後，DOS 計算を行った. DOS 計算を行う際には pseudopotential self-interaction correction (pSIC)法[3, 4]を用いてバンドギャップの補正を行った．また，全ての欠陥は電荷を持たない中性状態とした．

結果および考察　Fig. 1 に GaN 完全結晶と欠陥を含む GaN の DOS の比較を示す．Ga 空孔（V_{Ga}）と Ga 空孔と O の複合欠陥（V_{Ga}–O_N）を含む場合は価電子帯の 0～2 eV の間に欠陥に起因するピークが見られた．この欠陥準位が出来たことでバンド-欠陥準位間のエネルギー遷移（光吸収）が起こりやすくなることが結晶の着色の原因と考えられる．一方，V_{Ga}–O_N 欠陥中のタングリングボンドを H 原子で終端する事（V_{Ga}–O_N–2H）や V_{Ga} を Mg 原子で補填する事（Mg_{Ga}–O_N）で不純物準位のピークを抑えられることが分かった．これより, 適切な不純物の添加は光学特性劣化の低減に有効であることが分かった．

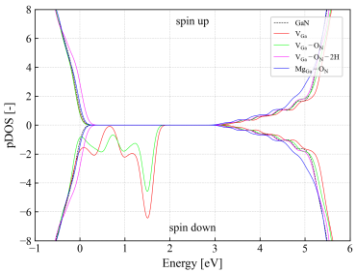

Fig. 1 Total density of states of GaN with V_{Ga}-related defects. The valence band maximum is set to be zero.

謝辞：本研究を進めるにあたって有益なご助言を賜りましたパナソニック株式会社の隅智亮氏, 滝野淳一氏, 三重大学の秋山准教授に感謝致します. また, 本研究の一部はJSPS 科研費 20H00352, 20H02639，大阪大学レーザー科学研究所の共同利用・共同研究の支援を受けて行われました．

[1] 隅 智亮ら，第 68 回応用物理学会春季学術講演会，17a-Z27-5 (2021). [2] P. Giannozzi et al., J. Phys.: Condens. Matter **29**, 465901 (2017). [3] A. Filippetti et al., Phys. Rev. B **67**, 125109 (2003). [4] M. Wierzbowska et al., Phys. Rev. B **84**, 245129 (2011).