

第一原理計算を用いた高濃度シリコンドープ窒化ガリウムの電子状態

Electronic states investigation of heavily silicon-doped gallium nitride using first-principles calculations

和歌山大学システム工学研究科 ○(M2) 山口 泰大, 小田 将人

Wakayama Univ, ○Yasuhiro Yamaguchi, Masato Oda

E-mail: s216293@wakayama-u.ac.jp

窒化ガリウム(GaN)を用いて、高出力のレーザーダイオードを実現するためには不純物を高濃度にドープする必要がある。藤岡らは高濃度にシリコン(Si)をドープした GaN をパルススパッタリング蒸着により作製した[1]。断面透過電子顕微鏡によって、結晶構造は $1.0 \times 10^{21} \text{cm}^{-3}$ の非常に高い Si 濃度状態でウルツ鋼構造を保っていることがわかった。結晶構造は明らかになったが、個々の Si 付近での構造は不明のままである。応用のためにはミクロの電子状態の解明が必要となる。本研究では密度汎関数法に基づく第一原理計算を用いて、高濃度 Si ドーピング GaN の電子状態について明らかにすることを目的とする。

本研究では 256 原子のウルツ鋼構造 GaN スーパーセルのモデルを用いる。2 個の Ga 原子を Si 原子に置換する。図 1 に計算モデルを示す。Si 原子間の距離を変えた様々な、モデルの全エネルギーを計算し各配置に対する欠陥生成エネルギーを以下の式を用いて算出する。

$$E_{gen} = E_{per} - i\mu_{Ga} + i\mu_{Si} - E_{def}$$

ここで、 E_{per} は 256 原子の欠陥のない GaN の全エネルギー、 μ_{Ga} は Ga 原子 1 つあたりのエネルギー、 μ_{Si} は Si 原子 1 つあたりのエネルギー、 E_{def} は*i*個の Ga 原子を Si 原子に置換した GaN の全エネルギーである。図 2 に Si 間の距離に対する E_{gen} を示す。Si 同士の距離が大きくなるほど欠陥生成エネルギーが小さくなっており、Si 原子は偏析せずに存在していることがわかる。発表では Si の濃度に対する状態密度などの比較についても詳細に議論する。

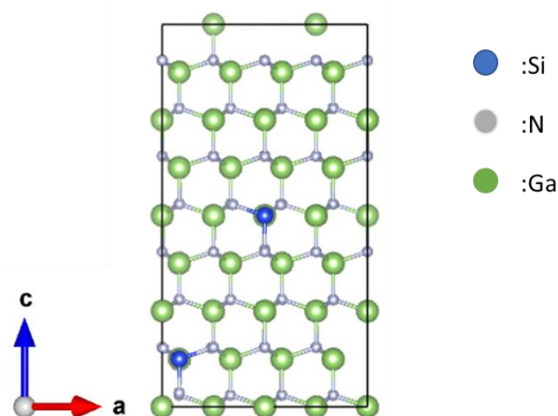


図 1: Ga 原子 2 個を Si 原子に置換したモデル

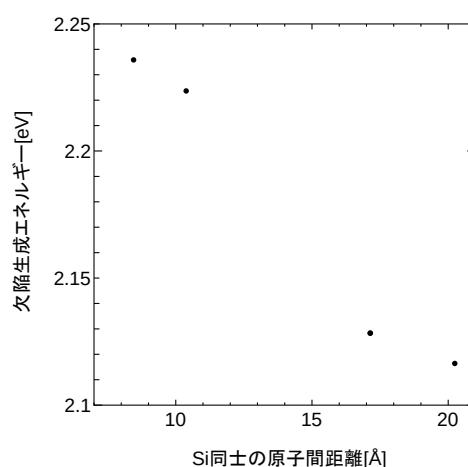


図 2: 距離に対する欠陥生成エネルギー

[1] Taiga Fudetani, Kohei Ueno, Atsushi Kobayashi, Hiroshi Fujioka, Appl. Phys. Lett. **118**, 072101 (2021).