

第一原理計算によるワイドギャップ半導体窒化ガリウム(GaN)における欠陥準位の解析

点欠陥の形成エネルギー、電荷、光学遷移など様々な物性情報が得られます

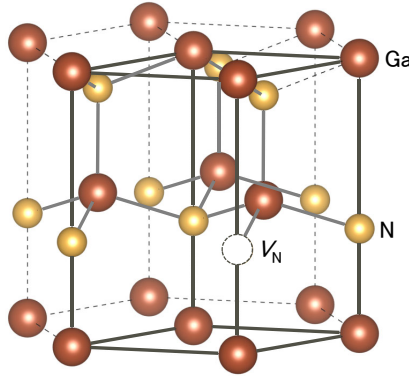
測定法 : 計算科学・AI・データ解析、PL
 製品分野 : パワーデバイス、酸化半導体、太陽電池
 分析目的 : その他(物性予測、電子状態評価)

概要

ワイドギャップ半導体である窒化ガリウム(GaN)は主にパワーデバイスの分野で用いられ、近年では急速充電器や5G通信基地局用途としての需要が高まっています。高信頼性を有するGaNの開発にあたっては、結晶中の欠陥量の低減や欠陥がもたらす電気/光学特性などへの影響の理解が重要です。本資料では第一原理計算を用いてGaN中の窒素欠損(V_N)が形成する欠陥準位の解析を行った事例を紹介いたします。本解析は欠陥だけでなく、元素の置換など結晶材料中の様々な点欠陥に対して適用可能です。

データ

■ GaN結晶構造



a, b (Å)	c (Å)	α, β (°)	γ (°)
3.1891	5.1855	90	120

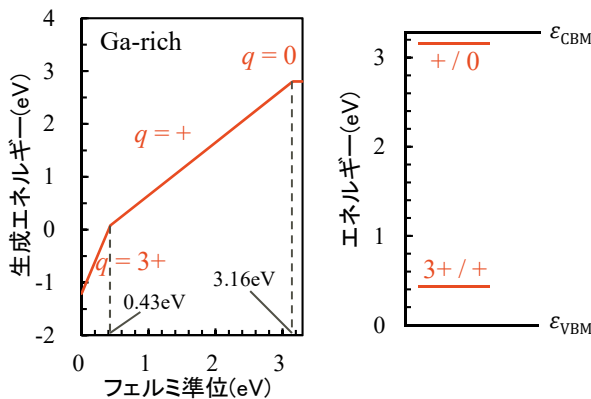
※図はVESTA(<https://jp-minerals.org/vesta/jp/>)を用いて作成

■ 第一原理計算による欠陥生成エネルギーの計算

$$E^f(V_N^q) = E_t(V_N^q) - E_t(\text{GaN}) + \mu_N + q(\varepsilon_{\text{VBM}} + \varepsilon_F) + \Delta^q$$

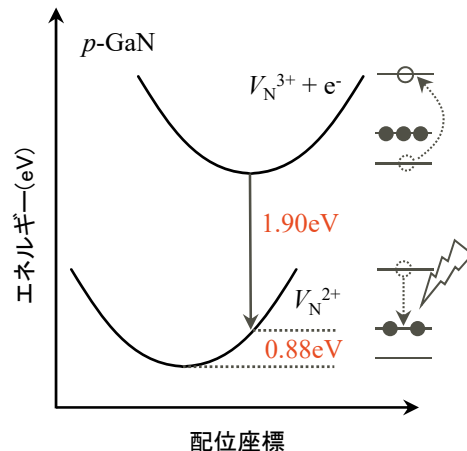
- $E^f(V_N^q)$: V_N の生成エネルギー
- $E_t(V_N^q)$: V_N を含む系の全エネルギー
- $E_t(\text{GaN})$: 完全結晶の全エネルギー
- μ_N : Nの化学ポテンシャル
- q : 欠陥の有する電荷
- ε_{VBM} : 価電子帯上端のエネルギー位置
- ε_F : フェルミ準位のエネルギー位置
- Δ^q : 補正項

■ V_N の生成エネルギー、ギャップ内の遷移準位



$q > 0$: 欠陥が正に帯電(ドナー)
 $q < 0$: 欠陥が負に帯電(アクセプター)

■ 光学遷移(配位座標曲線)



欠陥がもたらす電気/光学特性への影響の理解に有効

分析サービスで、あなたの研究開発を強力サポート!