

第34回 無機材料に関する最近の研究成果発表会 –材料研究に新しい風を–
住友会館 平成29年1月26日(木) 16:10~16:50

紫外発光素子のための巨大分極電荷を 利用した新しいバンドエンジニアリング

竹内哲也

名城大学理工学部材料機能工学科

本日の内容

■ 背景

- 深紫外LEDとp-AlGaN
- 分極とそれを利用したドーピング

■ 目的

- 「分極電荷エンジニアリング」の構築

■ 検討内容

- 理論検討
- 有用性実証
- 新規素子構造

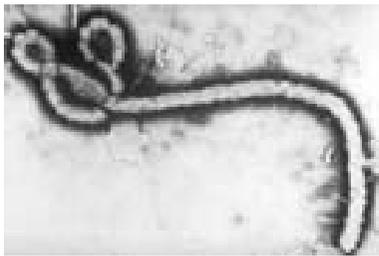
■ まとめ

背景：深紫外LED

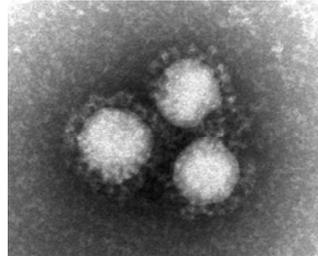
青色（470nm、2.6eV）よりも短い波長（**270nm、4.6eV**）のLED実現
⇒ 安心・安全な社会の実現

応用分野

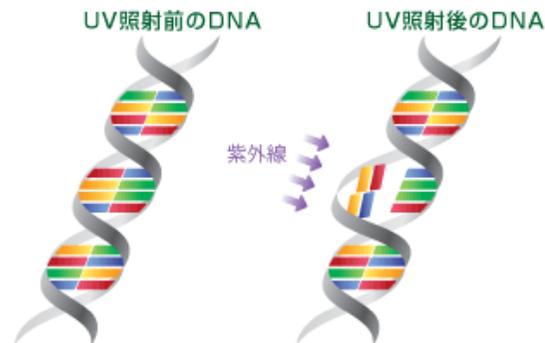
深紫外光（～270nm）による殺菌・不活性化



エボラウイルス
(国立感染症研究所)



MERSウイルス
(国立感染症研究所)



日機装ウェブサイトより



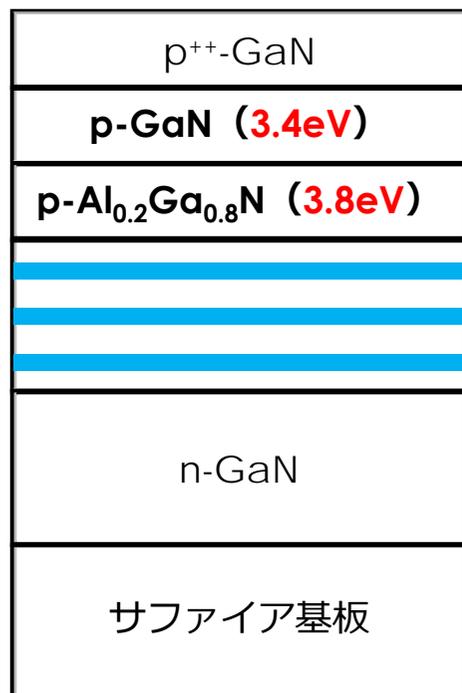
270nmの光はDNAに直接作用し、ほとんどのウイルスや菌を不活性化

東京エレクトロンウェブサイトより

背景: デバイス構造

青色LED 470nm

2.6~3.8eV



p~1×10¹⁸cm⁻³

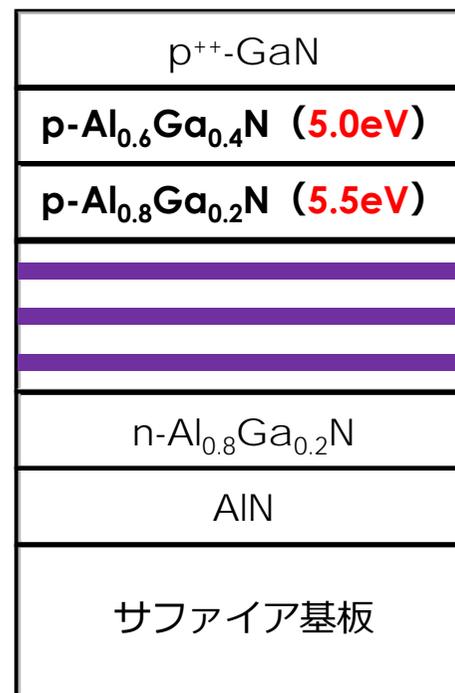
p~1×10¹⁷cm⁻³

GaInN
量子井戸
(2.6eV)

短波長化に伴い全層で
約2eVの増大

深紫外LED 270nm

4.6~5.5eV



p~1×10¹⁶cm⁻³

p~1×10¹⁵cm⁻³

Al_{0.4}Ga_{0.6}N
量子井戸
(4.6eV)

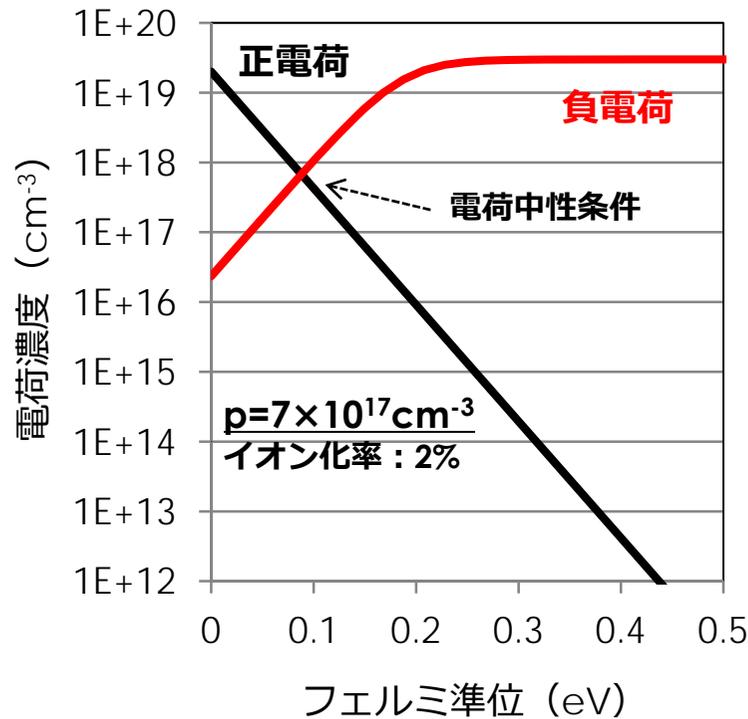
⇒正孔濃度2桁低下

⇒活性層に正孔が注入できず、効率低下

背景：p型AlGaIn層の状況

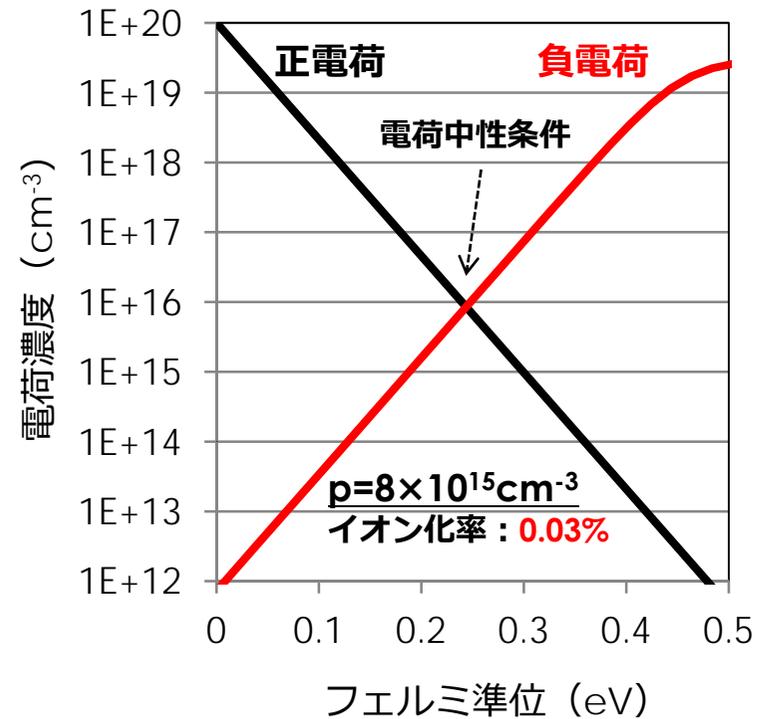
p-GaN

E_g (バンドギャップ) : **3.4eV**
 E_A (イオン化エネルギー) : **150meV**
 N_A (アクセプタ濃度) : **$3 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$**



p-Al_{0.6}Ga_{0.4}N

E_g : **5.0eV**
 E_A : **420meV**
 N_A : **$3 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$**



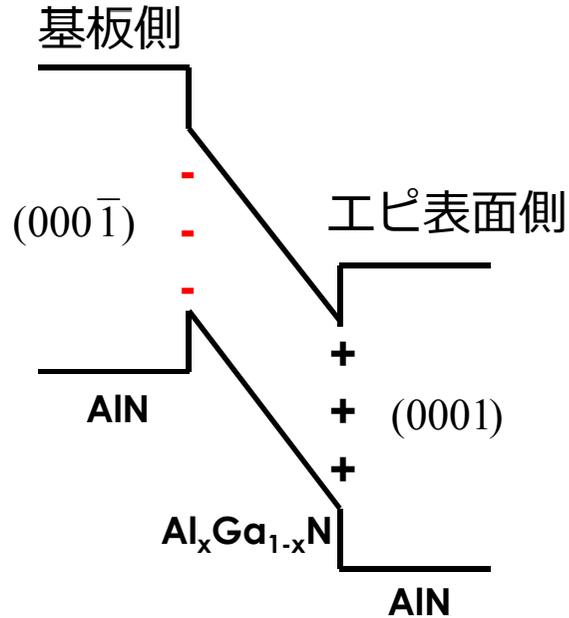
● **正電荷** : $p = N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{kT}\right)$

● **負電荷** : $N_A^- = \frac{N_A}{1 + 4 \exp\left(\frac{E_A - E_F}{kT}\right)}$

電荷中性条件 :
正電荷 = 負電荷

背景: 巨大分極の発生

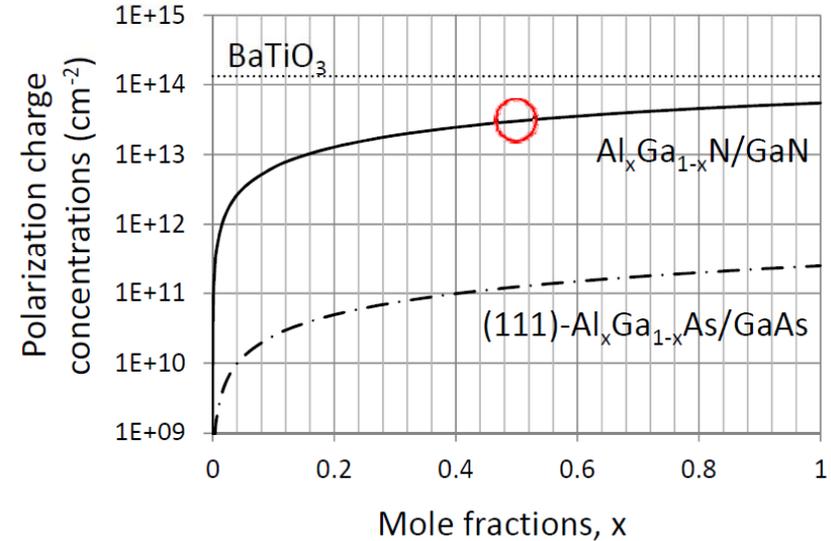
AlGaN/AlN構造



中心対称性の欠如と組成差により
自発・ piezo分極が界面に発生

表面に向かうに従い、

- ・ 低Al組成側に分極**負**電荷
- ・ 高Al組成側に分極**正**電荷
(必ず正負対で誘起)



例えば、AlNモル分率差50%

- ・ 強誘電体並みの大きさ
- ・ $3 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ の面積電荷濃度

$10^{18} \sim 10^{19} \text{cm}^{-3}$ の体積濃度に相当
(10~100nm分布を仮定)

ただし、これら電荷は動けない

背景：分極ドーピング

●動かない分極電荷に逆符号のキャリア蓄積

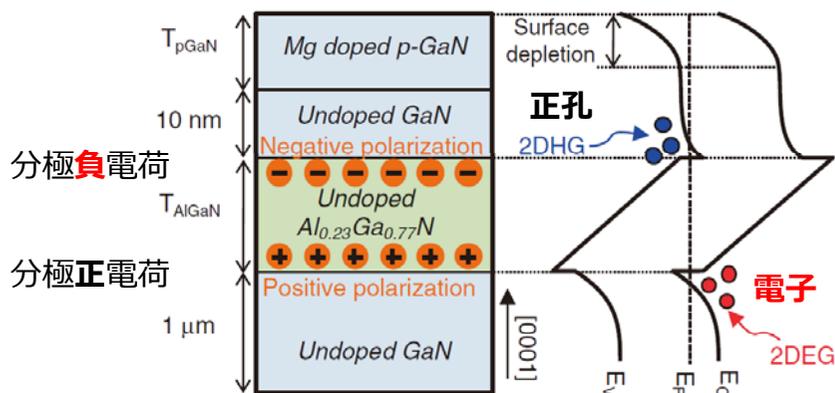
High Density Two-Dimensional Hole Gas Induced by Negative Polarization at GaN/AlGaN Heterointerface

Akira Nakajima, Yasunobu Sumida¹, Mahesh H. Dhyani, Hiroji Kawai¹, and E. M. Sankara Narayanan

Department of Electronic and Electrical Engineering, University of Sheffield, Mappin Street, Sheffield S1 3JD, U.K.

¹POWDEC K.K., 1-23-15 Wakagi-cho, Oyama, Tochigi 323-0028, Japan

Received October 7, 2010; accepted November 22, 2010; published online December 10, 2010

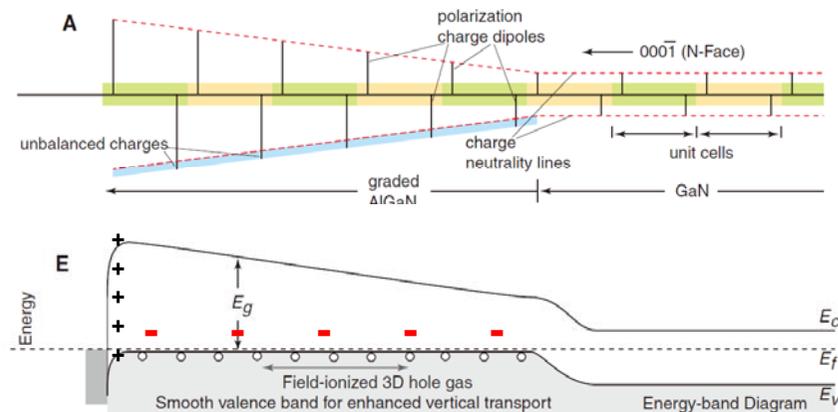


不純物ドーピング必要なし

●組成傾斜層により層状キャリア蓄積

Polarization-Induced Hole Doping in Wide-Band-Gap Uniaxial Semiconductor Heterostructures

John Simon, Vladimir Protasenko, Chuanxin Lian, Huili Xing, Debdeep Jena*



縦方向伝導も可能に

従来の不純物ドーピングに変わる、新しい手法の提案

- 深紫外LED実現に必要な、
 - ・高Al組成AlGaN (0.6以上) での実証ほとんどなし
 - ・不純物ドーピングとの相互作用の詳細検討なし

本研究の目的と内容

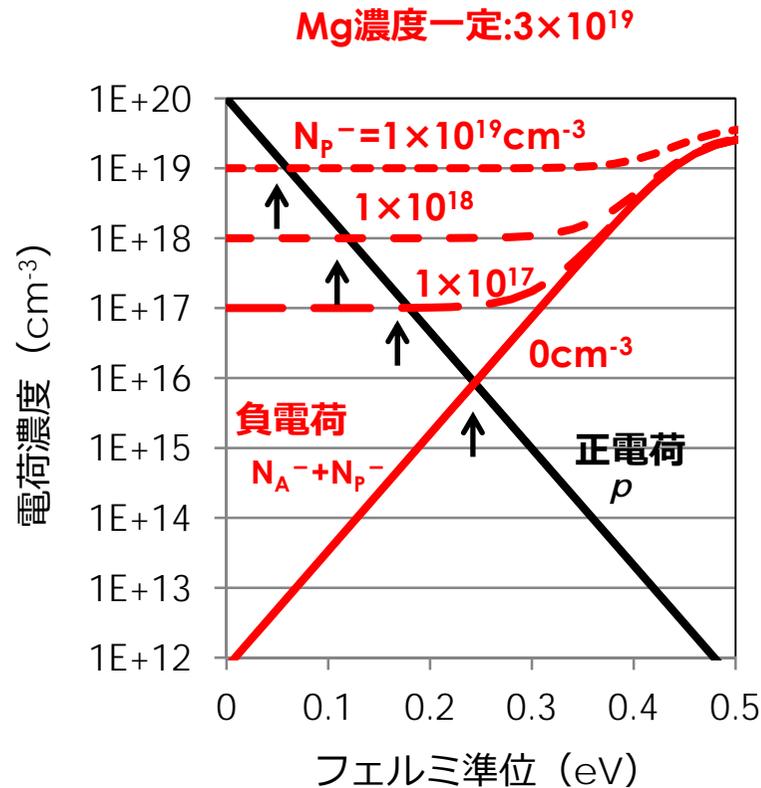
- 巨大分極電荷を利用したドーピング（分極ドーピング）の理論検討
 - 不純物ドーピングと分極ドーピングの相互作用
- 高AlNモル分率AlGaNにおける分極ドーピングの有用性実証
 - 分極ドーピング高Al組成AlGaNのキャリア濃度実測
 - 深紫外LEDへの適用
- 「分極電荷エンジニアリング」による新素子構造
 - 分極電荷によるポテンシャルエンジニアリングによる新素子構造設計

理論検討: 分極ドーピング

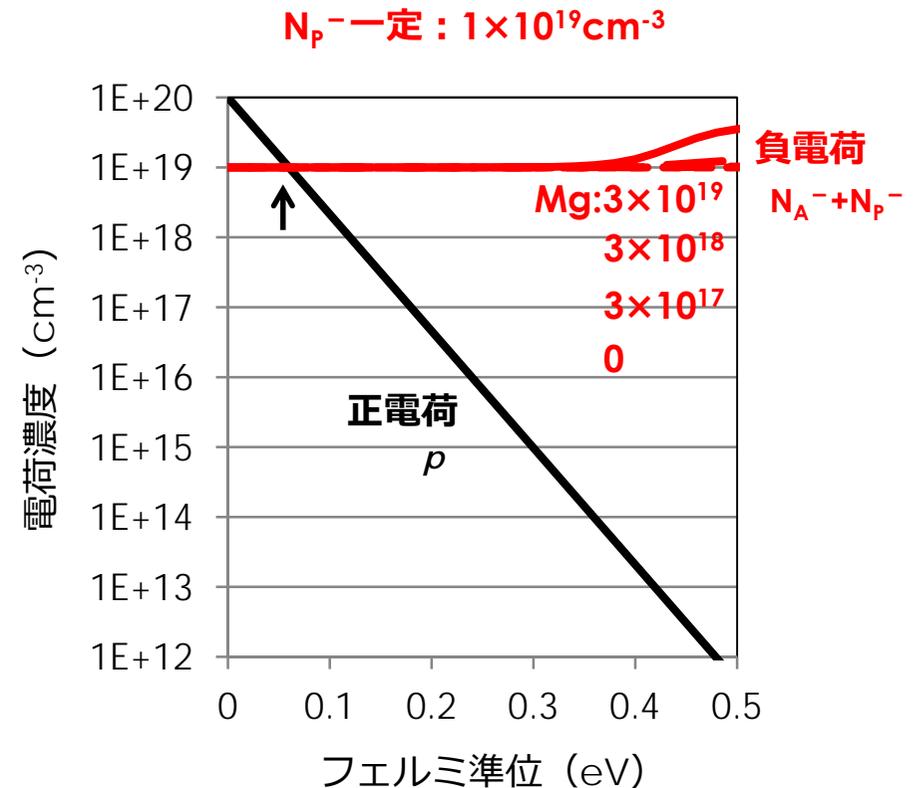
- 不純物ドーピングと分極ドーピングの相互作用の詳細検討必要
 - 不純物と分極の組み合わせで効果ありと報告あるが？
 - 分極は必ず**正負**対で発生、相反する場合の検討がない
- 二つの場合に分けて検討
 - 同じ目的（ともに正孔生成）の場合
 - Mgアクセプタ（**負**）と分極**負**電荷の組み合わせ（効果は？）
 - 相反してしまう場合
 - Mgアクセプタ（**負**）と分極**正**電荷（電子生成）の組み合わせ（打ち消す？）

理論検討: Mgアクセプタと分極負電荷 (同じ目的)

分極負電荷濃度 (N_p^-)依存性



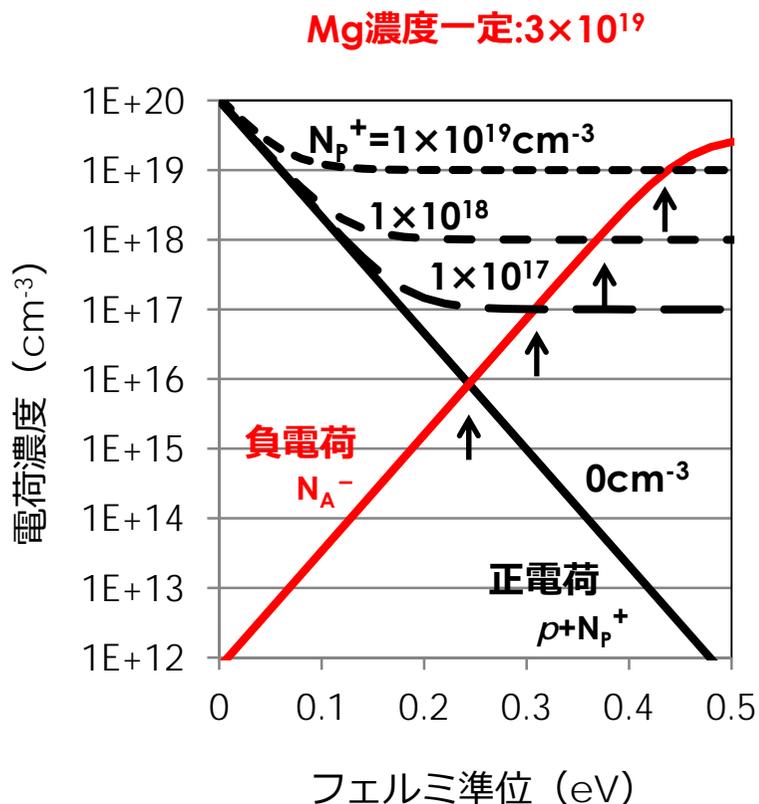
Mg濃度依存性



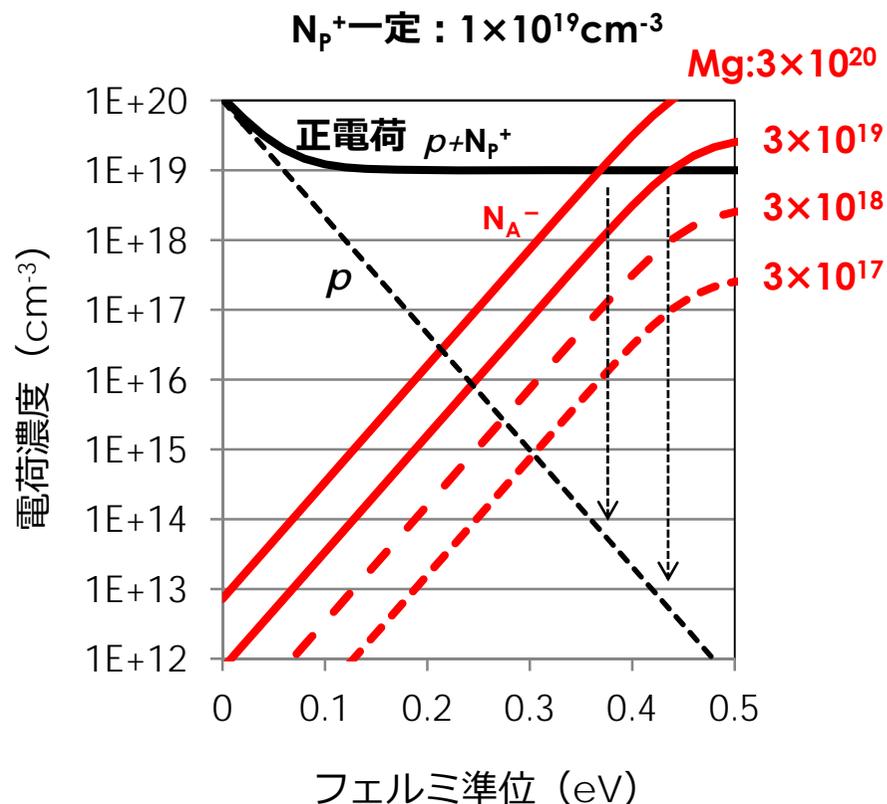
- 高正孔濃度 (10^{19}cm^{-3}) が蓄積する
- Mgイオン化せず (10^{13}cm^{-3})、正孔生成できない (効果なし)

理論検討: Mgアクセプタと分極正電荷(相反)

分極正電荷濃度 (N_p^+)依存性



Mg濃度依存性



- 極めて高いMgイオン濃度 (10^{19}cm^{-3})、多くの正孔生成
- 極めて低い正孔濃度 (10^{13}cm^{-3}) しか蓄積しない

理論検討: 不純物ドーピングと分極ドーピングの関係

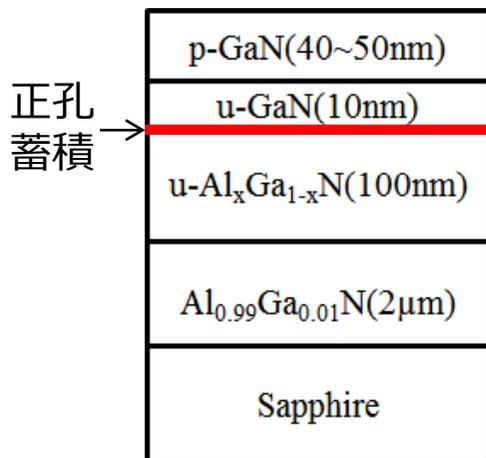
	分極 正 電荷	分極 負 電荷
p型形成		
不純物ドーピング	必須 (> 分極電荷)	必要なし
イオン化不純物 (負)	高 (= 分極濃度)	極めて低い
正孔濃度 (正)	極めて低い	高 (= 分極濃度)
		正孔が移動
n型形成		
不純物ドーピング	必要なし	必須 (> 分極電荷)
イオン化不純物 (正)	極めて低い	高 (= 分極濃度)
電子濃度 (負)	高 (= 分極濃度)	極めて低い
	電子が移動	

結局、分極は不純物イオン化エネルギーの大小に関係なく、そのイオン化率を高くできる

有用性実証: AlNテンプレート上AlGaN

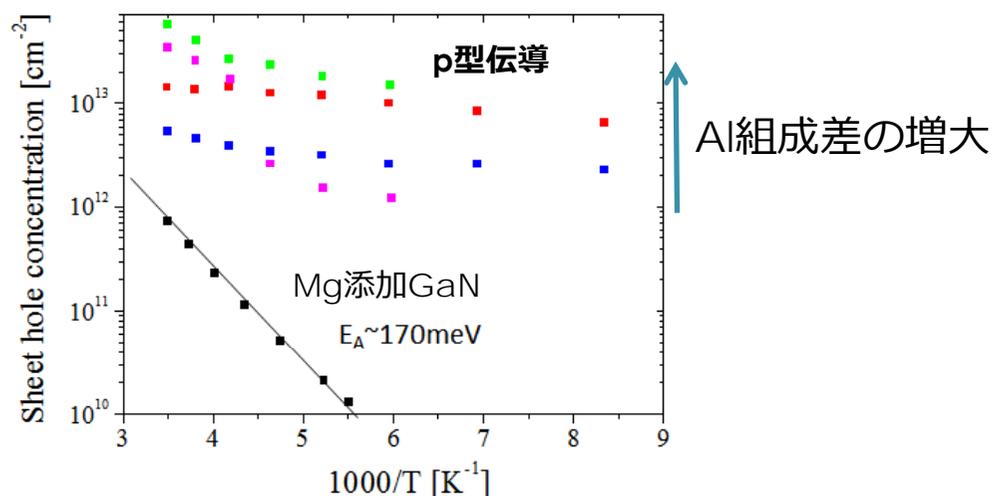
高Al組成AlGaN/AlNヘテロ構造：界面分極負電荷への高濃度正孔蓄積の検証

試料構造



Al組成：0.23~0.8

ホール測定によるキャリア濃度評価

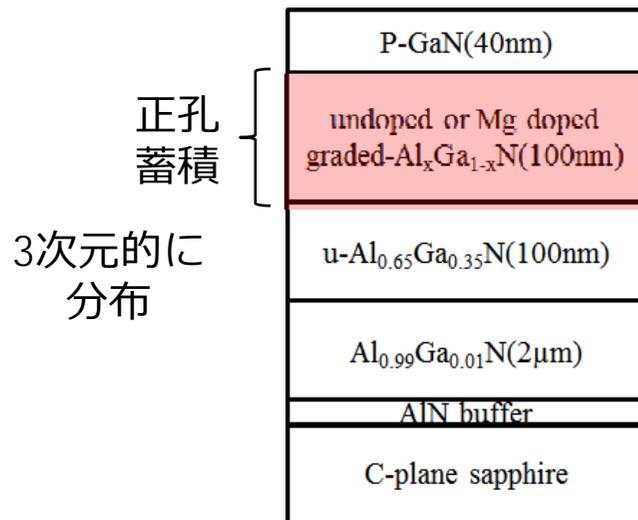


- 理論で予想されるオーダ ($\sim 10^{13}\text{cm}^{-2}$) の正孔濃度を実証
- ・ 温度依存性なし：イオン化エネルギーに依存しない

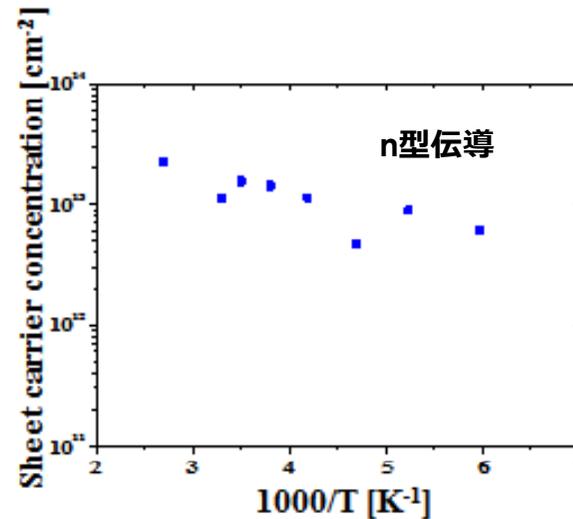
有用性実証: AlNテンプレート上組成傾斜AlGaN

深紫外LED用組成傾斜AlGaN構造: 層状分極負電荷への高濃度正孔蓄積の検証
⇒三次元的にキャリアが分布し、縦伝導が期待

試料構造



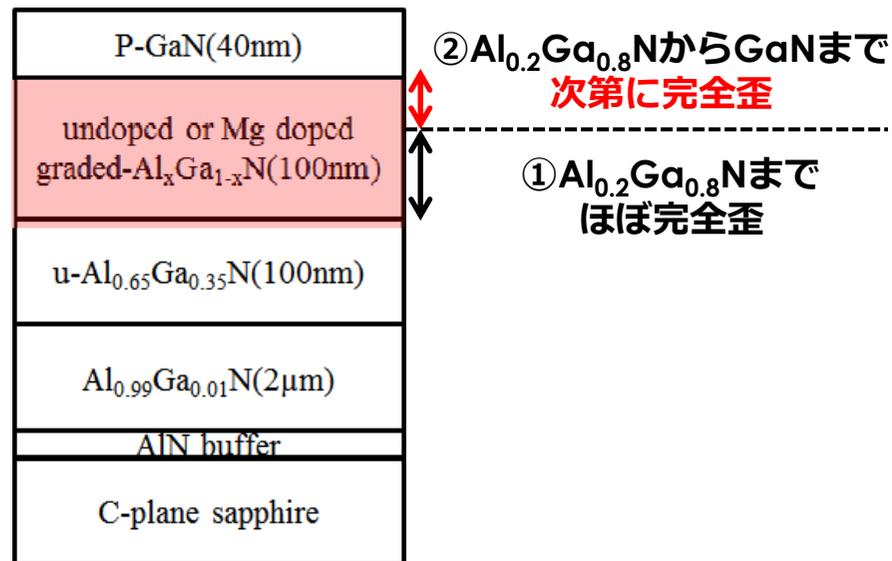
ホール測定によるキャリア濃度評価



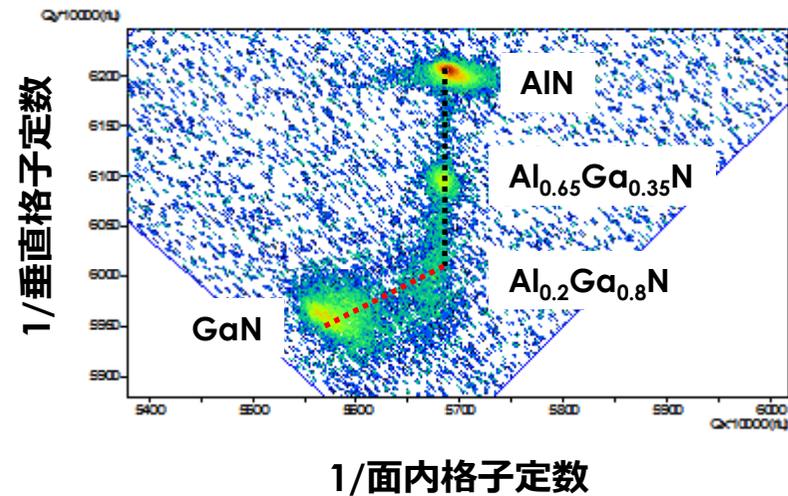
ところが予想に反し、**n型伝導**を観測
⇒電子が蓄積してしまっている!

有用性実証:格子緩和の重要性

試料構造と格子緩和



逆格子マッピングによる格子定数評価

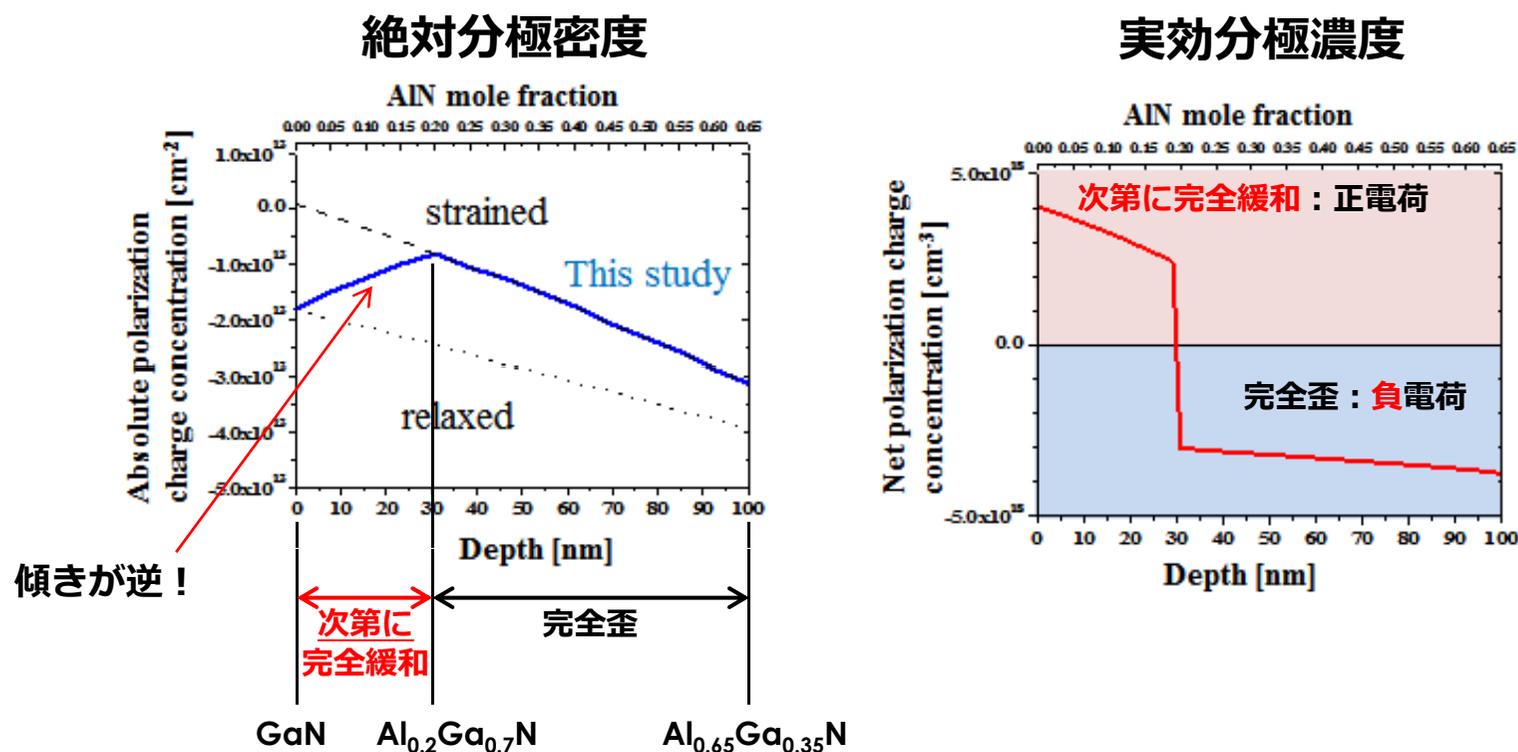


組成傾斜AlGaN (0.65 \Rightarrow 0) において、以下の二つの部分が形成

- ① 0.65 \sim 0.2まで：ほぼ等しい面内格子定数、すなわち**ほぼ完全歪**
- ② 0.2 \sim 0まで：次第にGaNの面内格子定数へ、すなわち**次第に完全緩和**

有用性実証:格子緩和の重要性

前ページのような格子緩和がある場合の分極電荷の発生（理論計算）



「**次第に格子緩和**」という状況が逆符号である**正**の分極電荷を誘発：
これにより、正孔ではなく**電子**が蓄積してしまう！

⇒この領域にMgを添加すれば、p型にはできる、全体で 10^{18}cm^{-3} の正孔濃度を實現

有用性実証：深紫外LEDへの適用

深紫外LED構造

従来構造

P-GaN (150nm)
p-Al _{0.8} Ga _{0.2} N(20nm)
AlGaN/AlGaN 3QWs
n-Al _{0.7} Ga _{0.3} N (1μm)
n-graded-Al _x Ga _{1-x} N (x:1-0.7) (1μm)
AlN(2μm)
sapphire

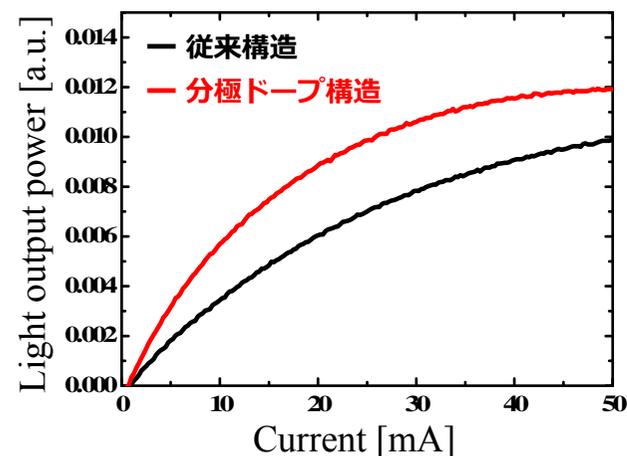
分極ドープ構造

p-graded-Al _x Ga _{1-x} N (x:0.8-0) (150nm)
p-Al _{0.8} Ga _{0.2} N(20nm)
AlGaN/AlGaN 3QWs
n-Al _{0.7} Ga _{0.3} N (1μm)
n-graded-Al _x Ga _{1-x} N (x:1-0.7) (1μm)
AlN(2μm)
sapphire

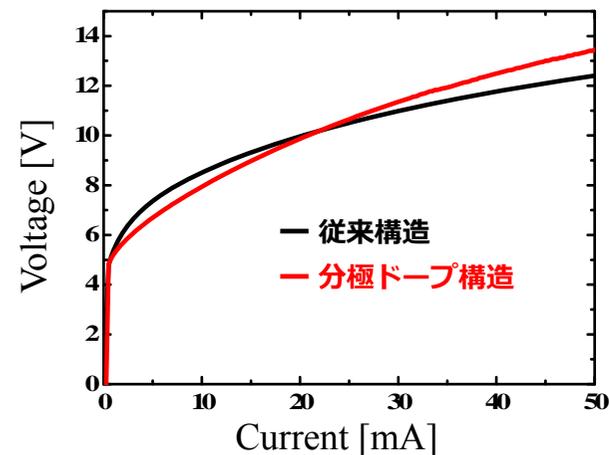
組成傾斜分極ドープ

光出力、すなわち注入効率の改善を実証

I-L特性



I-V特性



新素子構造：分極ドープの有効活用

これまで、分極ドープを不純物ドープの単なる置き換えとして検討

分極の特徴を積極的に活かして利用するためには？

「分極ドープ」を「不純物ドープ」と比較すると、、、

メリット

- とにかく大きな分極電荷濃度により、高濃度キャリア蓄積
- 不純物が不要なので結晶性の劣化なし

デメリット

- 必ず両方の電荷が誘起してしまう
- 面方位と組成差方向により生成するキャリアの符号が確定（低い自由度）

新素子構造：分極ドープの有効活用

これまで、分極ドープを不純物ドープの単なる置き換えとして検討

分極の特徴を積極的に活かして利用するためには？

「分極ドープ」を「不純物ドープ」と比較すると、、、

メリット

- ・とにかく大きな分極電荷濃度により、**高濃度キャリア蓄積**
- ・不純物が不要なので**結晶性の劣化なし**

デメリット

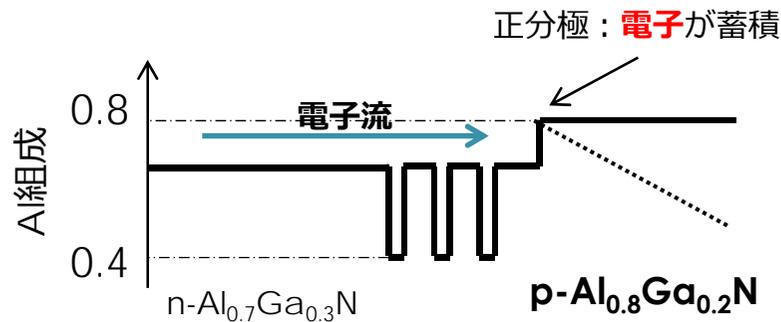
- ・必ず**両方の電荷**が誘起してしまう
- ・面方位と組成差方向により生成するキャリアの符号が確定 (**低い自由度**)

新しい方針

- ・活性層内で積極使用 (低い正孔注入の改善)
- ・既存のpn接合配置に分極電荷も整合する配置
- ・(従来の設計思想を棚上げし) 分極を優先した設計

新素子構造：分極ドープの有効活用

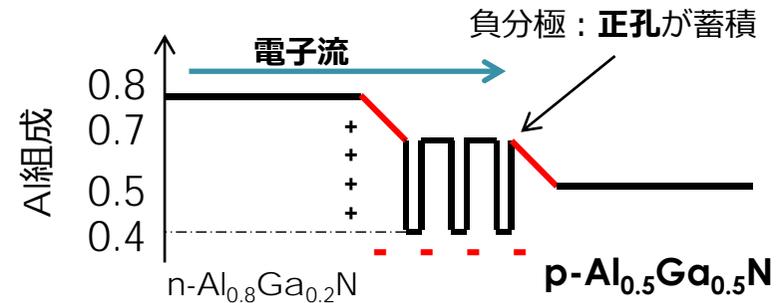
従来 バンドギャップ重視



p側にワイドバンドギャップを使用
(従来からの設計思想)

- ・ p-AlGaNの不十分な正孔
- 組成傾斜層を利用しても
- ・ 大きな分極**正**電荷が存在

新構造 分極電荷重視



バンドギャップよりも分極電荷を優先
(分極電荷の適材適所)

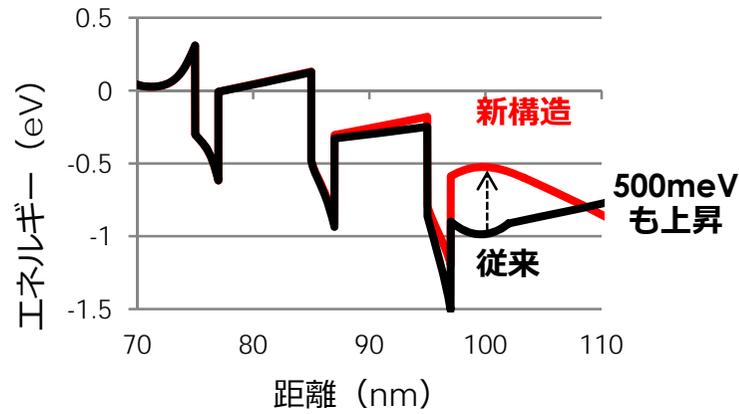
活性層に分極**負**電荷 (正孔蓄積)
n層に分極**正**電荷 (電子蓄積)

- 分極電荷の有効活用による注入効果改善
- ×狭いバンドギャップによる注入効率低下
(トレードオフ)

シミュレータによる理論計算を遂行

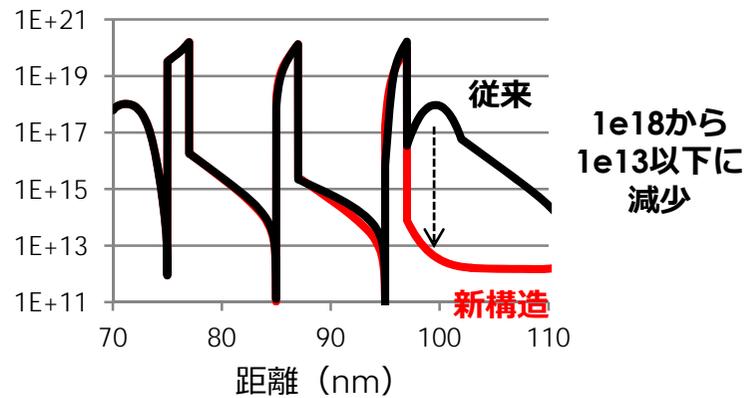
新素子構造：分極ドープの有効活用

活性層周辺の伝導帯プロファイル



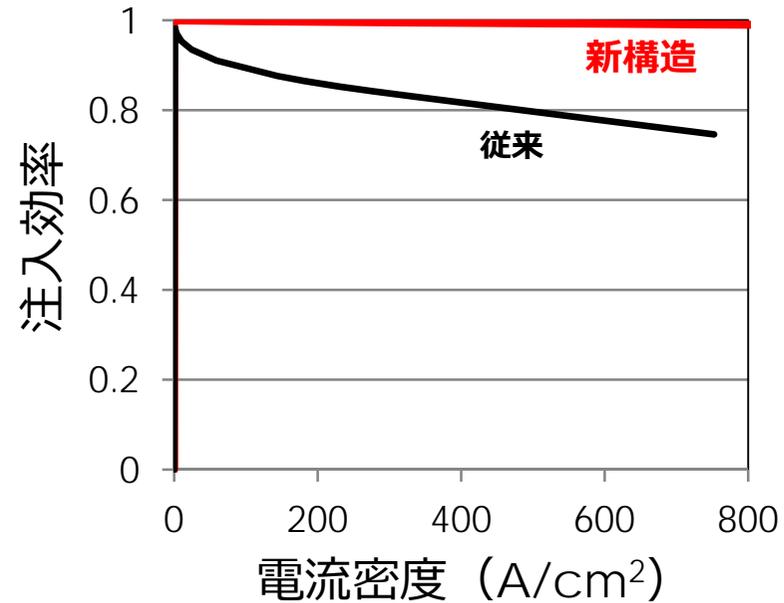
電子に対する大きな障壁形成

活性層周辺の電子濃度



上記の大きな障壁により、
電子のオーバーフロー（漏れ）が大幅抑制

活性層への注入効率



p層バンドギャップは0.8eV減少
一方、障壁としては0.5eV上昇

⇒分極負電荷の効果は
バンドギャップよりも大
⇒分極電荷によるポテンシャル制御

まとめ

- **理論検討**：p型AlGaInへの分極ドーピング
 - 高正孔濃度を実現、分極正電荷がイオン化率を高めていると解釈可
- **有用性実証**：AlN上高Al組成AlGaIn
 - $\sim 10^{18} \text{cm}^{-3}$ を実証、ただし格子緩和に注意（符号反転の可能性）
- **新素子構造**：分極の有効活用
 - 「分極電荷」重視のポテンシャルエンジニアリングが有効である可能性

「分極電荷エンジニアリング」により、
安心・安全社会を構築する、窒化物半導体光デバイスの実現

謝辞

- 平成25年度日本板硝子材料工学助成会
- 平成26~28年度科研費 基盤研究B
- 平成27~28年度科研費 挑戦的萌芽