

縮退した半導体の PL スペクトルについて

簡単のために三次元直接遷移半導体 (GaAs など) を考えます。Eg=1.0eV としましょう。電子が縮退して、Fermi 準位が伝導帯の底から 0.2eV まで上がっているとします。さて、例えば 1.5eV のエネルギーを持つレーザー光を照射します。価電子帯頂上の電子が 1.5eV 上まで励起され、早い時間で緩和して Fermi 準位まで落ちてきます。しかし、Fermi 準位までは電子が詰まっていますので、それ以下、例えば伝導帯の底まで落ちてくることはないと思います。ただ、その時点では価電子帯頂上には正孔が出来ていますので、伝導帯の底にある電子がこれと再結合できます。とすれば、観測される PL ピークのエネルギーは Eg である 1.0eV となります。

従って、AlGaIn/GaN 系での 2DEG (二次元電子ガス) の話ですが、縮退していても 2DEG の Fermi 準位以下にある、量子化準位 (n=1 ; QL1) からも PL が起こっているということになります。もし、縮退していない場合にもこの QL1 から価電子帯 (量子化されていなければ頂上、量子化されていれば量子状態) への PL が出てくると言うことです。

次に、Fermi 準位にある電子も PL 発生源となり得ると言うことの説明をします。上の三次元モデルに戻って考えれば、実際は 1.0-1.2eV (Eg から Ef) の幅の広い PL が観測されるというのが結論です。以下に少し説明します。

参考にする論文は、以下の三つです。

- [1] C. Lee, N.Y. Lee, et al., J. Appl. Phys. **77**(12), 6727 (1995).
- [2] J. D. Sheng, Y. Makita, et al., J. Appl. Phys., **53**(2), 999 (1982).
- [3] D. Olego & M. Cardona, Phys. Rev., **B22**(1980)886

上記文献 1 の図 2 ですが、室温における Te-doped GaAs の PL スペクトルです。電子濃度が増えると Fermi 準位が伝導帯以上に上がってきますので、PL ピークも高エネルギー側にシフトしています。3x10¹⁷cm⁻³あたりで縮退が始まるとこの論文には書いてあります。黒三角は PR のデータから出した閾値エネルギーで、縮退が始まると Fermi 準位と一致していることとなります。なお、縮退する以前の PL と PR のピークのずれについては、今は直接関係ないとして省略します。詳しくは文献 1 を読んで下さい。

次に、参考文献[2]の図 3、5、6 を参照して下さい。これも同じ Te-doped GaAs の PL スペクトルです。同じようにキャリア濃度が増えるにつれて PL ピークの位置が高エネルギー側にシフトしています。上の文献 1 図 2 が室温でしたので、これに比べれば参考論文[2]の研究成果の方が低温にする事でスペクトル形状がきれいに出ています。見事なデータです。濃度の増加によって PL ピークの形状が大きく変わっていることがわかりますね。この論文では更に形状についてかなり系統的な議論がなされています。図 5(文献 2)は PL スペクトルを理論的に計算したもので、(a)が band 間直接遷移、(b)がバンド間間接遷移、(c)がアクセプターの関わる遷移の場合です。これ以降は、簡単のため、不純物を介した遷移、キャリア濃度が増えた事によるキャリアの遮蔽効果 (screening)、更に、バンド形状の二次関数からのずれ (band non-parabolicity) は、議論をやめておきます。少し詳しい議論をする場合にはそれぞれ重要なファクターとなりますが、詳しく知りたい人は教科書、或いは論文を読んで下さい。我々の研究室でも以前 ZnO の光吸収に関してこの辺りの議論を行い論文も JAP に公表しています (研究室の HP を捜せば出てきます)。

直接遷移の場合は、バンドの底からの遷移ですので、キャリア濃度が増えてもその形状はあまり変わっていませんね。ところが間接遷移の場合は、どうでしょうか。キャリア濃度の増大が PL スペクトルの形状を高エネルギー側に大きくのばしています。高エネルギー側のストンと落ちたところあたり、がほぼ Fermi 準位と考えて良いでしょう。

図 6(文献 2)は発光遷移の模式図になります。価電子帯のアクセプターについてはここでは議論を

省略します。この図からもわかるように、 E_g から上の方 Fermi 準位 E_f までのエネルギー範囲にわたって PL 発光が観測されています。以上が PL スペクトルの解釈です。

ここまで来て学生の皆さんは多分、「GaAs は直接遷移半導体と習ったのに何で間接遷移が出てくるのだろう」と考えるでしょう。ここで言う間接遷移とは、光遷移に関して運動量 (k) 保存法則が成立しない場合に対しても言葉です。詳しくはまた別の論文を見なければなりません、不純物が多く導入されたために運動量空間での保存則が乱れてきます。特に縮退していると言うことはかなり多くの不純物が入っていると言うことです。従って、電子遷移にはイオン化したドナー不純物との散乱が関わってきます。この運動量の緩和が間接遷移として、Fermi 準位近くの電子を価電子帯まで遷移を引き起こす事になります。図 6 では光遷移の直線が斜めになっていますが、これのことです。

以上、一番簡単な GaAs バルクに対しての PL スペクトルについて簡単に説明しましたが、二次元の量子井戸、或いは三角ポテンシャル井戸の中の 2DEG になると、更に複雑な議論が必要になります。しかしながら、形状は別にしても E_g から E_f までのエネルギー範囲での PL は観測されるであろうということになります。

更に補足です。添付の図 6(文献 3)は、p-GaAs の話で実験と計算結果が出ています。幅の狭い運動量の保存される遷移（先ほどの直接遷移のこと）と、保存されない幅広い遷移がきれいに出ています。

なお、これらの論文は材料物理の図書室（或いは中央図書館）にあると思いますので、興味にある諸君は読んでみて下さい。Fermi 準位の数値計算などもっと詳しい議論がしてあります。