



AlInGaN系バンド計算と利得、 吸収に関する数値解析

McMaster大学 Minco He・Xun Li

(有)ノアコンサルティング 横山 清行

1. はじめに

窒化ガリウム (GaN) に代表される窒化物半導体は、歴史的には結晶成長、さらに、デバイス応用上はp型半導体が困難であったため、多くの研究者がこれらの克服や改良に努力してきた。これら諸問題を克服し、現在では、省エネの追い風があり、青色発光ダイオード (LED) や白色LED、画像情報を高密度記録の必要性が各家庭にまで及ぶようになり、ブルーレイ (Blue-ray) ディスクとして、直接、間接を含めて大きな産業となりつつある。これら光デバイスとしてだけでなく、電子デバイスでもマイクロ波デバイス、車載パワースイッチングデバイスとしてマーケットからの期待が大きい。

筆者らは、発光デバイスにバックグラウンドを置くものとして、産業の一層の発展のために多くの方が利用できるソフト開発に従事するものである。光デバイスでは最終的なデバイス応用を念頭に置きながら基板となるAlInGaN系量子井戸の設計をし、その結晶を製作しなければならない。そのためには、①歪量子井戸のバンド計算、②その結果を用いての利得や吸収の計算が必要である。更に、③指定方位の屈折率変化の計算も要求される。変長器などへの応用を考えると吸収係数を計算するときエキシトン効果の考慮が必要となる。GaN系でのこれら一連の計算は1990年の後半から開始された⁽¹⁾⁽²⁾。冒頭に記したようにマーケットは極めて魅力的であるにもかかわらず、製造には苦難の歴史があった。製造技術の進歩と共に、最近10年弱で混晶形成する基本材料のバンドギャップの修正報告⁽³⁾など数値計算精度が増してきた。このように、理論

が先行し産業の追従が遅れたことが主な利用と思うが、InPやGaAsのZincblend型の数値計算と比較してWurtzite型の窒化物半導体数値計算でデバイス設計者が利用できるものはほとんどない。

今回、Zincblend型とWurtzite型の両方の結晶構造に対応できる歪量子井戸数値計算プログラムを開発し、主としてWurtzite型のAlInGaN系にも適用したので報告する。

2. 開発プログラム実行結果

参考文献(1)、(2)のWurtziteタイプの歪量子井戸計算では 6×6 の $k \cdot p$ バンド計算が記されている。 6×6 のハミルトニアンは価電子帯のHH (重いホール)、LH (軽いホール)、SO (スピン軌道) バンドの相互作用を表現したものである。これはSOバンドの相互作用を考慮しない 4×4 の $k \cdot p$ バンド計算よりは適用範囲が広いが、計算はより複雑となっている。我々のプログラムは、伝導帯との相互作用も含む一層適用範囲の広い 8×8 の $k \cdot p$ バンド計算である。

まず、計算結果が妥当かどうかを検証するため、AlGaIn系では参考文献(2)、InGaIn系では参考文献(4)の結果を価電子帯バンドについて比較した結果をそれぞれ、図1(a)、(b)に記す。いずれも良好な結果を得た。

バンド計算の結果得られる行列要素の2乗を用いて数値積分することで、利得 (損失) の計算が可能である。詳細についてはこの分野の教科書を参考にされたい⁽⁵⁾。Wurtzite型では良い比較例を見つけることができなかったため、我々のプログラムはZincblend型の7 nm井戸幅の $\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ の結果⁽⁶⁾と比較した。その

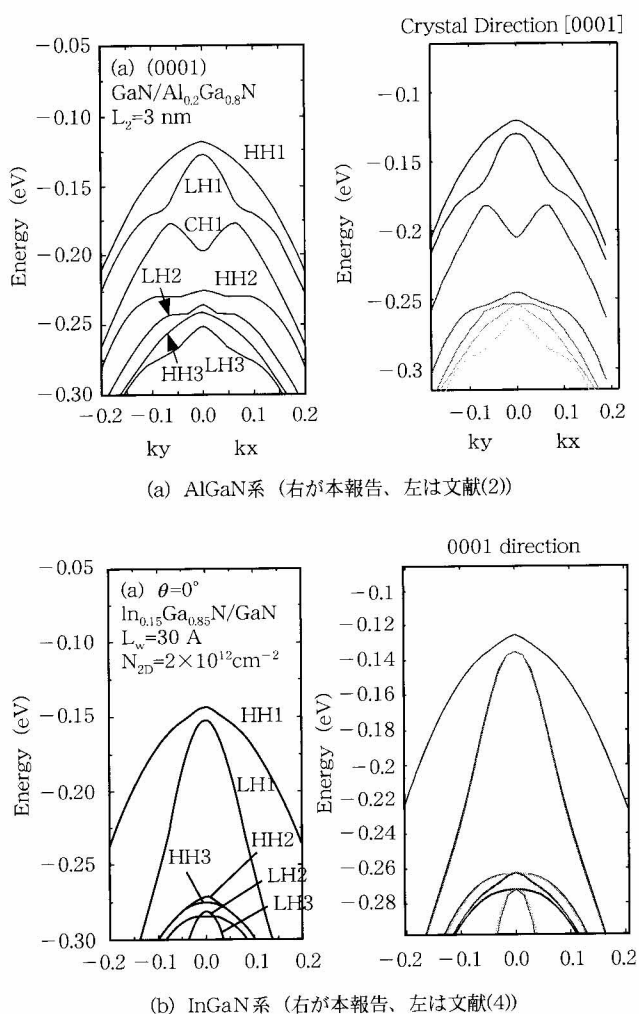


図1 バンド構造計算結果

nmのGaAs井戸層の両脇にAl_{0.3}Ga_{0.7}As障壁層を設けた量子井戸構造に対するChuangらの報告と本プログラムでの計算結果の比較である。図3(a)の(i)が印加バイアス0 Vで(b)の結果に対応し、良く一致していることがわかる。

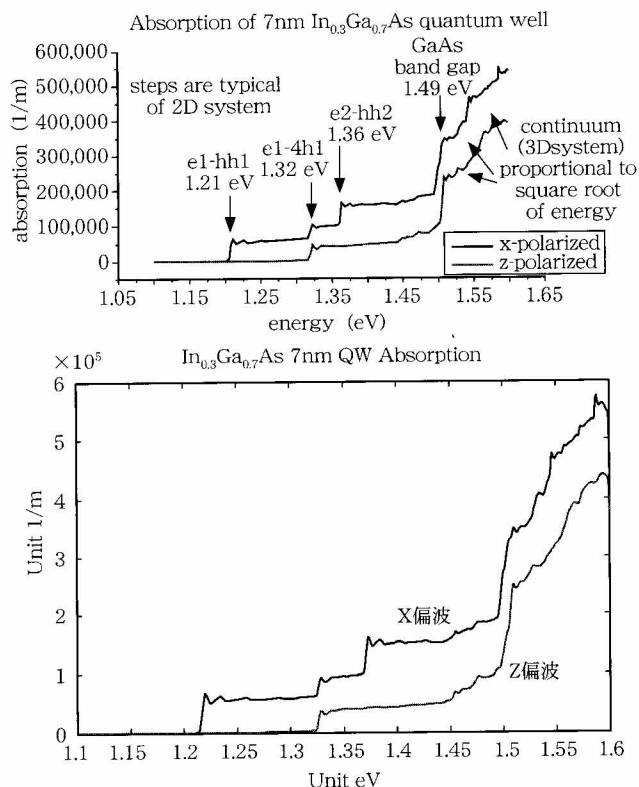


図2 吸収特性結果 (上文献(6)、下は本報告) x偏波：TE、z偏波：TM

結果、図2の良好な吸収係数特性の結果を得た。

変調器への応用では、量子閉じ込めシュタルク効果(QCSE)の評価が重要になる。高エネルギーの光子が井戸層に注入されると電子、ホールが生成され、クーロン力によるエキシトン束縛状態となる。このお互いに引き合うポテンシャルによるエキシトン効果は電子とホール間のエネルギーをExだけ小さくする。これは、見掛け上バンドギャップがEx小さくなったような効果で吸収係数に大きな影響を与える。詳細については、この分野の教科書を参考にされたい⁽⁷⁾。

QCSE効果もモデリングの妥当性はChuangらの論文⁽⁸⁾と比較した。彼らは文献(8)で実験結果と計算結果を比較し良好な一致を報告している。彼らはエキシトングリーン関数法を用いているのに対して、我々はシュレージンガー方程式に含まれるエキシトンポテンシャルをサブバンド間の結合を数値解析することで求めた。ここでもZincblend型材料となるが、図3は9.4

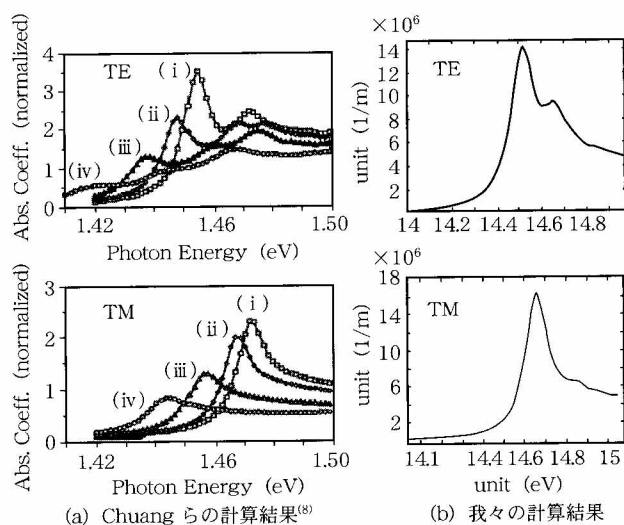


図3 QCSEをも考慮した吸収係数特性

以下の計算では、図4に示すように、 $\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ 井戸層3 nm、GaN障壁層構造に対して行った。

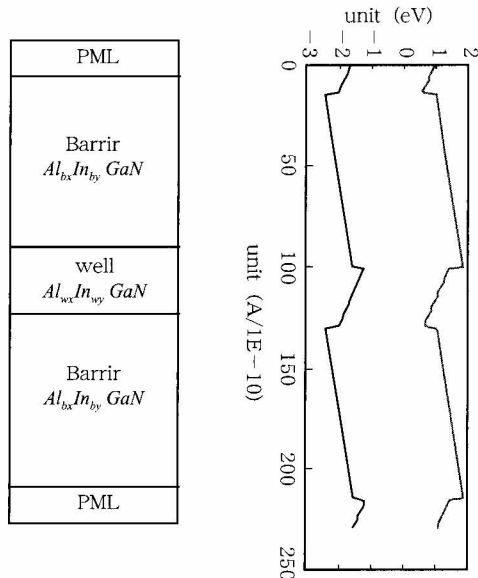
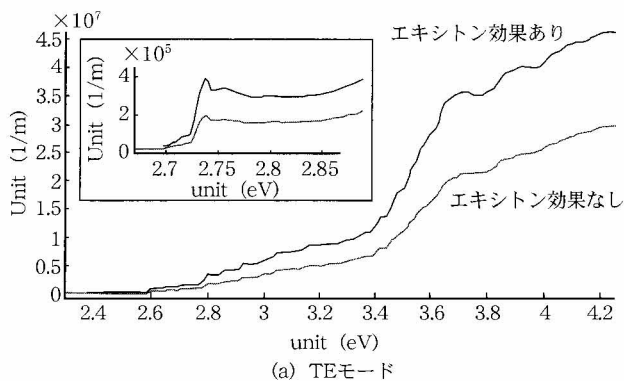
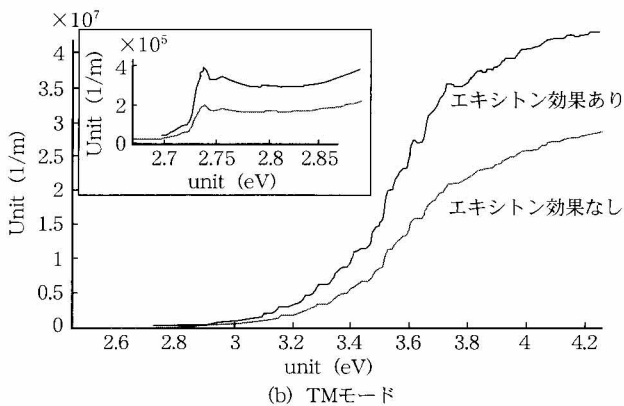


図4 InGaN/GaNヘテロ構造



(a) TEモード



(b) TMモード

図5 本ヘテロ構造デバイスの吸収特性のエキシトン効果挿入図は低エネルギー領域のズーム。

図5はTEおよびTMモードに対する、本ヘテロ構造デバイスの吸収特性である。

この図から、TE、TMモードともにエキシトン効果により吸収係数が増加していることがわかる。具体的にTEモードで波長 $1.33\ \mu\text{m}$ 入力に対して、 $1.31\ \mu\text{m}$ での吸収係数は $196/\text{m}$ となる。これは $1\ \text{mm}$ 伝搬の時の1dB値 $230.3/\text{m}$ より小さい。即ち、本デバイスでは、 $1\ \text{mm}$ の伝搬は1dB以下であることがわかる。

吸収係数からKK (Kramers-Kronig) 変換により複素屈折率を導くことができる。そしてバイアスの変化による屈折率変化が求められ、変調器の設計などではこれらの特性が用いられる。本プログラムでは、これら一連の特性を評価することができる。図6は逆バイアスを印加することで量子井戸構造のポテンシャルは変化する様子を示した。図7はTE、TMモードの屈折率のバイアス依存性の計算結果である。さらに、この屈折率から求めた屈折率変化のバイアス依存性を図8に記す。

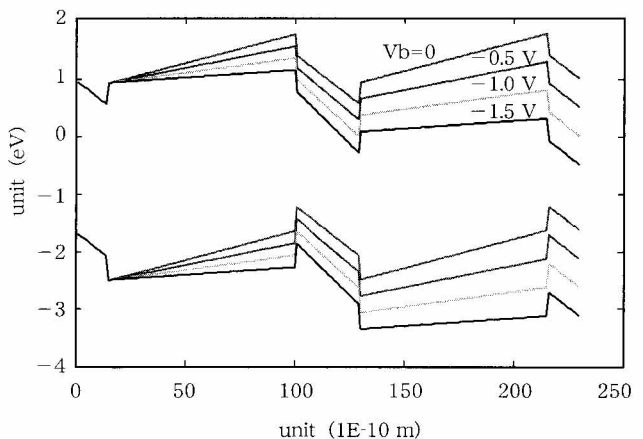


図6 ポテンシャルのバイアス依存性

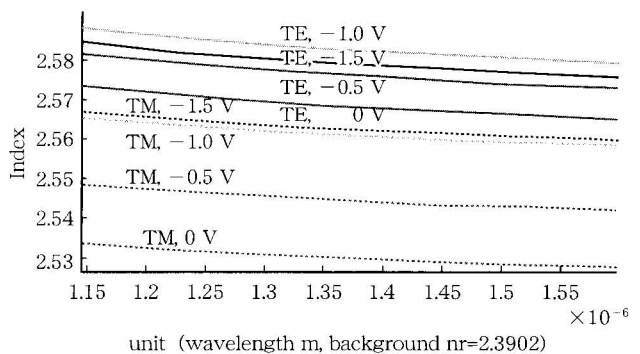


図7 屈折率のモードおよびバイアス依存性

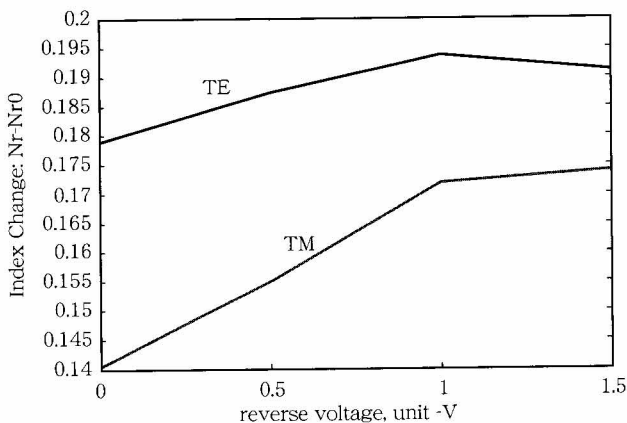


図8 屈折率変化のバイアス依存性

3. おわりに

Zincblend型に加えてGaN系のWurtzite型歪量子井戸バンド解析プログラムをベースにQCSE効果まで含んだ利得（吸収）や屈折率を印加バイアスを変化させて計算できるプログラムを開発した。

<参考文献>

- (1) S. L. Chuang and C. S. Chang : "A band-structure model of strained quantum-well wurtzite semiconductors", *Semicond. Sci. Technol.*, Vol.12, pp.252-263 (1997)
- (2) S. H. Park : "Crystal orientation effects on electronic properties of wurtzite GaN/AlGaIn quantum wells with spontaneous and piezoelectric polarization", *Jpn. J. Appl. Phys.*, Vol.39, pp.3478-3482 (June, 2000)
- (3) T. Matsuoka, H. Okamoto, M. Nakao, H. Harima, and E. Kurimoto : "Optical bandgap energy of wurtzite InN", *Appl. Phys. Letts.* Vol. 81, pp.1246-1248 (Oct. 2002)

- (4) S. H. Park : "Crystal orientation effects on electronic properties of wurtzite InGaIn/GaN quantum wells", *J. Appl. Phys.*, Vol.91, pp. 9904-9908 (June, 2002)
- (5) S. L. Chuang : *Physics of Optoelectronic Devices*, ch. 9, John Wiley & Sons, Inc. (1995)
- (6) <http://www.nextnano.de>
- (7) S. L. Chuang : *Physics of Optoelectronic Devices*, ch.13, John Wiley & Sons, Inc. (1995)
- (8) S. L. Chuang et al. : "Exciton Green's-function approach to optical absorption in a quantum well with an applied electric field", *Phys. Rev., B*, Vol.43, pp.1500-1509 (Jan. 1991)

【筆者紹介】

Minco He

McMaster University
Department of Electrical and Computer Engineering
Graduate Student
1280 Main St W Hamilton, ON L8S 4L8, CANADA
TEL : +1(905) 525-9140
E-mail : heg2@mcmaster.ca

Xun Li

McMaster University
Department of Electrical and Computer Engineering
Professor
ITB-A313 1280 Main St West
Hamilton, ON L8S 4K1 CANADA
TEL : +1(905) 525-9140 ext. 27698
FAX : +1(905) 521-2933
E-mail : lixun@mcmaster.ca

横山清行

(有)ノアコンサルティング 取締役社長
〒700-0854 岡山市東区瀬戸町江尻1607
TEL : 086-952-5288 FAX : 086-952-5278
E-mail : yoko@noah-c.com

Web講座

■ **情報セキュリティ入門講座** 定価:10,000円

■ **流量計測の不確かさ計算の考え方と計算方法** 定価:10,000円

■ **ゼロから学ぶPID制御** 定価:6,825円

ウェブ&メールベースのオンライン講座です。

登録後は6ヶ月間、自由な時間に繰り返し理解できるまで自己学習できます。理解度テストに合格した方には、修了証書を発行いたします。

<http://www.nikko-pb.co.jp>

日本工業出版(株) netsale@nikko-pb.co.jp