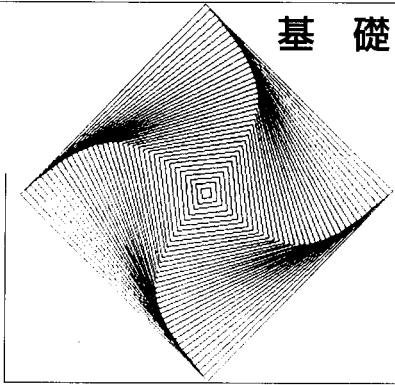


〈基礎編〉



基礎講座

〈シミュレーション技術〉

半導体レーザーのシミュレーション

横山 清行

高機能半導体レーザーの設計に必須なシミュレーション技術の考え方を、電子デバイスとの相違について述べることで概説する。半導体光デバイス特有のひずみ量子井戸構造を含む基板設計の重要性について記してある。レーザー共振器断面でのシミュレーションについては、電子デバイスのキャリア輸送に加えて屈折率や利得で光が閉じ込められるモデルを解説する。寸法がけた違いに大きな共振器方向については、主として光学特性に注目したシミュレーションを解説する。さらに高度化するシミュレーション技術の例として、最適化手法について言及する。

Keywords: semiconductor laser diodes, optical devices, photonic devices, MQWs, strained multiple quantum wells, DFB LDs, coupled mode equations, valence band engineering, optical gain, transfer matrix

1. ま え が き

光通信分野ではひずみ量子井戸分布帰還型 (Distributed Feedback: DFB) レーザー、一気に家庭への普及をめざす次世代光ディスク用 Blu-ray Disc 対応の青色レーザーなど、わたしたちの身近な所で大活躍、または、今後に大きな期待が寄せられているデバイスがある。これらの半導体レーザーは大学課程で学習する物性論、電磁気学、量子物理などに基づき動作しながら、実際に私たちの社会生活に貢献しているきわめて魅力的なデバイスである。

前回までの基礎講座で、シリコンや化合物半導体に対する電子デバイスに関する講座が展開された。電子デバイスのバックグラウンドの読者が多いことを念頭に置き、今回は、半導体光デバイスのシミュレーション技術として、レーザーに注目して解説する。

2. 半導体レーザー設計の難しさ

電子デバイスに加えて光学特性もシミュレーションしなければならないから難しいといってしまうえば、一見、的を得ているようにも思えるが、そんなに単純には片づけられない。

第1に基板設計が難しい。電子デバイスとは「基板」の概念が違っている。筆者の専門分野はもともとは電子デバイスである。電子デバイスでは基板は p 型、n 型半導体、また不純物ドーピング濃度など考慮するが、単にウエハーメーカーから購入したものであるのに対して、半導体レーザーでは、ひずみ多重量子井戸構造まで含めたものを「基板」と呼ぶ。半導体光デバイスでは、デバイス設計の前段

に基板設計 (結晶設計とも呼ばれる) が必須である。

第2に光学設計と電子デバイス設計の組み合わせが難しい。多くの場合にはこの両者を分けて考えるが、設計の複雑さは依然として存在する。しきい値の設計、発振波長の設計、高速動作の設計、高出力の設計、低ノイズの設計、環境温度変化に強い設計など多くの設計目標がある。設計者には、これらの組み合わせと、本講座では触れることができないが、そのうえに製造技術レベルを考慮して歩留まり向上目標が要求される。

これらの課題の難しさは、電子と光の波長がけた違いであることに起因する。電子としての効果は電子の波長である 10 nm 程度の隣接効果、キャリア輸送を含めても μm オーダーの記述で可能である。一方、光では μm 程度の波長が数十~数百、相互作用することを利用して、波長選択、ビームの集光などを行っている。

量子井戸半導体レーザーのシミュレーションは、長さ軸がけた違いの電子と光のモデリングが必要である。このため、端面から光を放出するタイプのレーザーダイオード (Laser Diode: LD) に対して、通常は図 1 (a) のように、共振器断面 (xy 断面: 第 4 章) と、図 1 (b) に示す共振器方向 (z 軸: 第 5 章) に解析を分けて取り扱う¹⁾。解析寸法が長いだけであれば、光導波路なども同種の数値解析上の課題があるが、半導体光デバイスの解析を難しくしているのは、温度の効果を含み、注入電流によって変化するキャリアの効果は利得や屈折率などに影響を及ぼすことである。この複雑な物理に関して理解を深めたい読者には文献 2 を薦める。

(有)ノア コンサルティング 〒259-1115 伊勢原市高森台 3-4-18, e-mail: yoko@noah-c.com

分類番号 7.7, 7.9

Semiconductor laser diode simulation. Kiyoyuki YOKOYAMA. Noah Consulting Limited (3-4-18 Takamoridai, Isehara 259-1115)

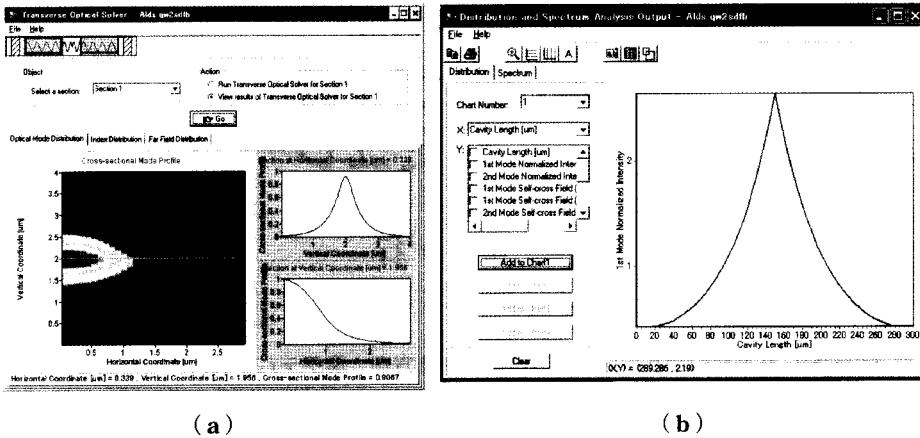


図1 半導体レーザーシミュレーター(Advanced Laser Diode Simulator: ALDS)の解析例¹⁾。(a)共振器断面での光強度分布, 上部左には共振器方向の構成図が示され, 共振器中央に位相シフト, その両端に回折格子が配置されていることがわかる。(b)共振器方向の光強度分布, 共振器中央に位相シフトが配置され, この部分で光強度が強くなっている。

果との組み合わせでバンド構造を制御するものである。さらに興味のある読者には文献4を薦める。

したがって, 基板設計には図2の第1列をパラメーターとする価電子帯の構造解析が必須である。半導体レーザーとして利用する各種のIII-V族半導体は直接遷移型で, 伝導帯の下端と価電子帯の上端が Γ 点にある。このためキャリアは Γ 点近傍から満たされるので, Γ 点近傍の価電子帯の構造解析を行えばよく, $k \cdot p$ 法が通常用いられる。

これは, 平面波成分とブロッホ関数の積でシュレーディンガー方程式の解が与えられるとして, $k=0$ の周りで展開すると $k \cdot p$ の成分が現れることから, $k \cdot p$ 法と呼ばれ, 簡単にしかも精度よく, k 空間の広がりのおおくない範囲内(Γ 点近傍)で, ひずみや量子効果を取り入れてバンド構造を数値解析で求めることができる。

図3は量子井戸構造での計算の実例を示す。図3(a)から, 圧縮ひずみを導入すると, 価電子帯構造が Γ 点で複雑なミキシングが解かれ, 理想である放物

線形に近づき, 図3(b)に示すように, 状態密度が小さくなっていることがわかる。高速動作であれば, 共振器長を長くできないので, 活性層体積を確保するために多重量子井戸(Multiple Quantum Well: MQW)の井戸数を増やし, 微分利得も大きくするなど, 最終的な半導体レーザーの性能仕様に基づき, 基板を設計しておかなければならない。

ドーピングやキャリア注入によるバンドの曲がりや, バンド計算手法に興味ある読者には文献6を薦める。

4. 共振器断面でのデバイス構造設計

本章は多くの読者にとってなじみやすい共振器断面(xy断面)での二次元解析について記す。電気的な取り扱いには, キャリアの挙動やそれに伴う利得の増加(第3章の検討結果をモデルとして取り込む)を自己無撞着に解かなければならない。この段階でヘテロ構造を構成する材料定数, 材料特有の物理モデル(例えばInP系ではオージェ再結合モデル, GaN系ではピエゾ効果モデルなど)を取り込む。

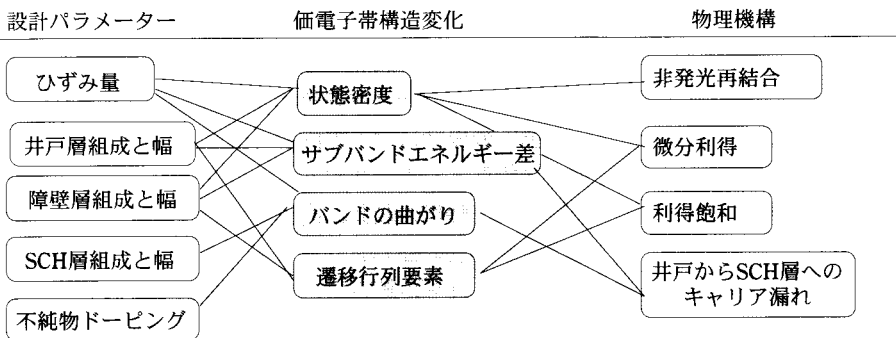


図2 価電子バンドエンジニアリングの関係, 量子井戸構造設計パラメーターが価電子帯の構造変化を通して, 半導体レーザーの物理機構に影響を与える相関図, SCHはSeparate Confinement Heterostructureの略である。

3. 基板(結晶)設計

半導体レーザーではキャリアを注入して, フェルミ準位を制御する。少ないキャリア注入でフェルミ準位を大きく制御したい。このためには小さな状態密度が望まれ, バルクと比較して量子井戸構造が有利である。

効率よくレーザー発振するためには, 電子とホールの状態密度を可能な限り近づけ, 誘導放出の効率化を図る。しかし, 一般にホールの状態密度は電子と比較して大きい。意図的に価電子帯を制御することが提案され, これは(価電子)バンドエンジニアリング³⁾と呼ばれて, 実用デバイスでは常用されている。

図2に, 基板設計パラメーターと, それによって制御されている価電子帯構造変化と, 対応する物理機構について記す。このように, デバイス性能を支配する物理機構を制御するには, 基板設計でどのパラメーターを制御すればよいか関係づけられる。ここでの「ひずみ」は, 意図的に格子定数の異なる材料を井戸層や障壁層に用いて, 量子効

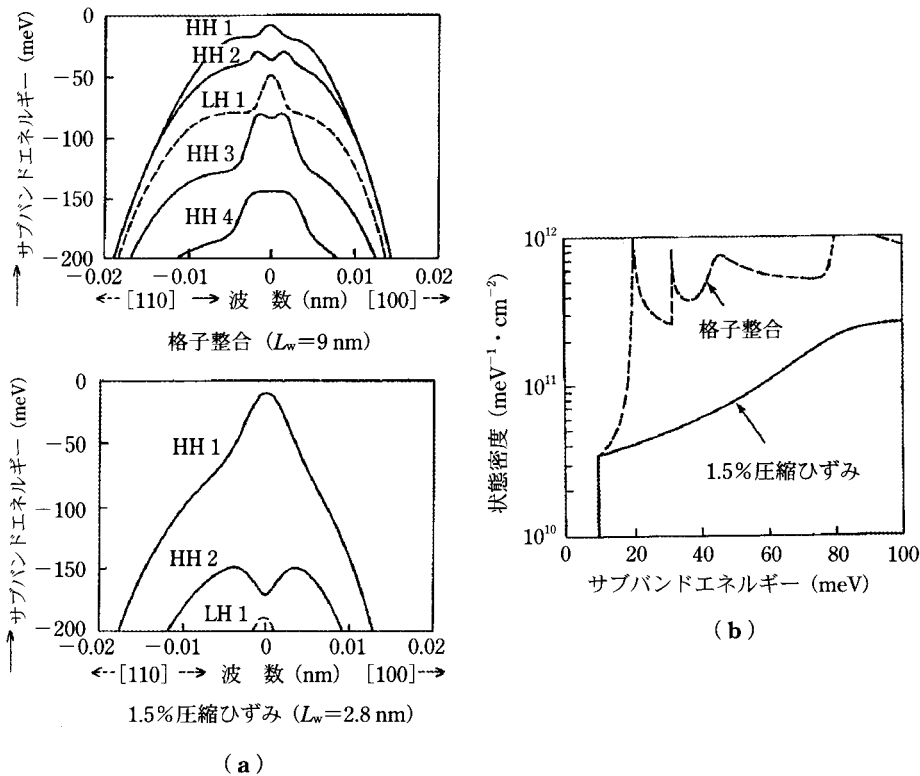


図3 InGaAs/InGaAsP 構造に対して、 $k \cdot p$ 法でバンド計算を行った結果。(a) 価電子帯のエネルギー計算結果。上図：格子整合系(井戸幅 $L_w = 9 \text{ nm}$)、下図：1.5%圧縮ひずみ(井戸幅 $L_w = 2.8 \text{ nm}$)。HH は Heavy Hole, LH は Light Hole を示す。(b) 対応する状態密度。

電子デバイスの解析ではこのあたりの技術は成熟している。

第2章で述べたように、半導体レーザーは通常の電子デバイスと異なり、レーザー発振させるために高濃度なキャリアを活性層に注入する。このためにボルツマン近似で取り扱うことができず、フェルミ統計を用いなければならない。したがって、実際の計算は単なる電子デバイスのシミュレーションよりもかなり複雑となる。同時に、一般的には光部分については、波動方程式の実部に屈折率、虚部に利得を反映させ、複素数固有値問題に帰着させる。さらに、電子部分と結合させ自己無撞着に解かなければならない。屈折率差に起因する閉じ込めのみでレーザーが動作していれば、実部だけの取り扱いが可能となり、簡単になる。

レーザー発振のしきい値近傍では、波動方程式を解き、損失と利得のバランスからレーザー発振のしきい値を求める。しきい値以上のバイアス条件では誘導放出モデルが効き光出力を計算する。波長多重 (Wavelength Division Multiplexing: WDM) 光通信用の光源としては、次章で述べる波長設計が重要になる。このようにDFBレーザーでは、ファブリー・ペローのように利得ピーク値ではなく、デチューニングした波長 (設計発振波長) での利得を用いてしきい値を見積もることになる。DFBレーザーの詳細に興味がある読者には文献8を薦める。

図4に計算の実例を示す。通常の製造では第3章で述べたように、活性層は基板 (結晶) 設計で対応し、その基板を用いて寸法を決めてメサ型加工を行う。したがって、注

目しているメサ形状と同様な形状が前後に繰り返されている。

このままの屈折分布で導波路解析を行うと、図4(a)のように、注目している中央領域の左右にも同じような光閉じ込め領域が現れる。これは屈折率とデバイス形状から決まる光分布である。一方、実際のレーザーでは中央の電極のみから電流が注入される。そのような状況での厳密なシミュレーションを行うと、図4(b)の結果を得る。すなわち、キャリアが注入されている領域のみでレーザー発振が起こり、その左右のキャリアが注入されない領域にはモードが立たない。これは、中央電極から注入されて上昇した利得の効果がシミュレーションに反映された結果である。

得られた近視野像から遠視野像を求めることもできるので、ファイバーとの結合を考慮したビームの形状の設計にも役立つ。

今回の例のように、屈折率導波

と利得導波の両者が起こっているモードでのシミュレーションでは、キャリア挙動と光学特性を同時にシミュレーションしなければならない。図5は対応するキャリア分布であり、同図(a)から電子やホールが活性層付近に注入されていることがわかる。同図(b)は(a)上図の電子濃度について、活性層部分を拡大して示したものである。

高次モードまで解くことで、キャリア注入とモードの関

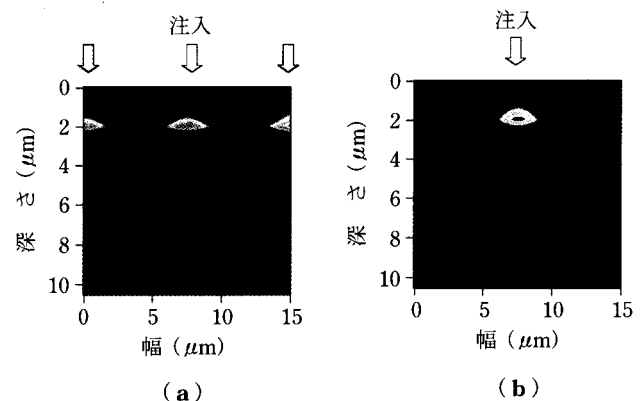


図4 リッジ型 $0.98 \mu\text{m}$ 励起光源用レーザーでの光強度分布の計算例。(a) 屈折率閉じ込めだけの効果だけを考慮したときの光強度分布。(b) 屈折率閉じ込め効果に加え、中央の電極から注入される電流によるキャリア増加に起因しての利得閉じ込め効果まで考慮したときの光強度分布 (屈折率+利得閉じ込め効果)。

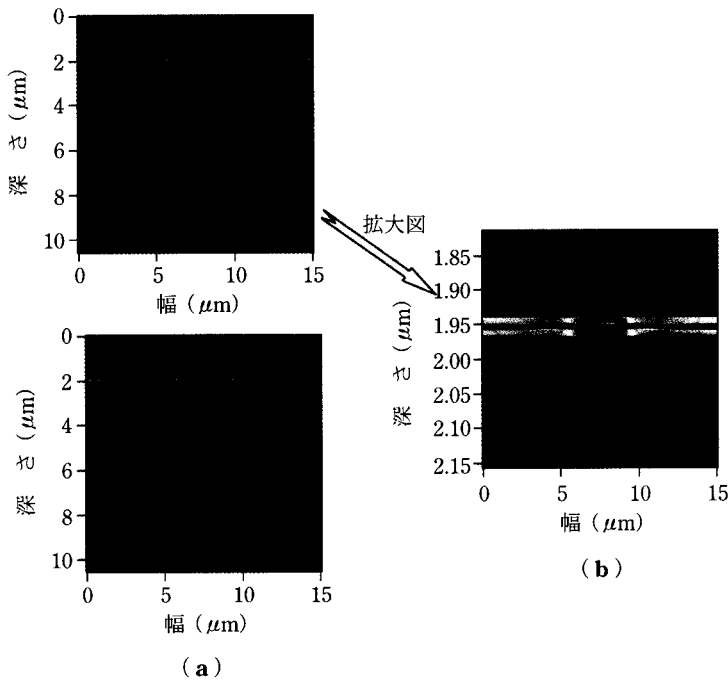


図5 利得導波を考慮した解析でのレーザー発振状態でのキャリア分布。(a)上図：電子濃度分布，下図：ホール濃度分布。(b)電子濃度分布の活性層付近の拡大図。

係を調べることができ、高出力でも安定した動作のレーザーの構造設計に利用することも考えられる。この種の解析は、長波、短波を問わず、リッジ構造設計、電流ブロック層を含む埋め込み構造設計など注入キャリアを効率よく活性層に閉じ込め、低しきい値、高出力レーザーの設計にも利用されている。

5. 共振器方向の構造(回折格子)設計

共振器(z 軸)方向に、屈折率の異なる周期 Λ で数百 μm にわたる繰り返し領域(導波路)を作成すると、この領域での反射波の干渉が生じ、(1)式で表されるブラッグ波長(λ_B)が選択される。

$$\lambda_B = 2\Lambda n_e \quad (1)$$

ここで、回折格子の周期が Λ であり、導波路の等価的な屈折率は n_e である。屈折率が高い領域(n_a)と低い領域(n_b)は通常の製造では50%のデューティであるために、 n_e は n_a と n_b の層の深さの差(エッチング深さ)で決まる。さて、

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} + (nk_0 - ja)^2 E = 0 \quad (2)$$

が一次元の波動方程式であり、 n として周期 Λ の屈折率分布を仮定する。また、 a は吸収(ロス)または利得(ゲイン)を示す項である。(2)式の電界は前進波(E_r)と後退波(E_s)の和として(3)式となる。ただし、 $\beta_0 = \pi/\Lambda$ である。

$$E = E_r(z)e^{-j\beta_0 z} + E_s(z)e^{j\beta_0 z} \quad (3)$$

(3)式を(2)式に代入し、前進波と後退波を変数とする

ように整理すると、よく知られた結合波方程式となる。回折格子の深さ(エッチング)に関する結合係数 κ を用いて、結合波方程式を行列表現すると(4)式となる。ここで Ω は位相項である。

$$\frac{d}{dz} \begin{pmatrix} E_r \\ E_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(\alpha + j\Delta\beta) & -j\kappa e^{-j\Omega} \\ j\kappa e^{j\Omega} & (\alpha + j\Delta\beta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_r \\ E_s \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} E_r \\ E_s \end{pmatrix} \quad (4)$$

(4)式は転送行列(Fマトリックス)の形式で(5)、(6)式のように書ける。

$$\begin{pmatrix} E_r(z) \\ E_s(z) \end{pmatrix} = \left(\cosh(\gamma z) I + \frac{\sinh(\gamma z)}{\gamma} A \right) \begin{pmatrix} E_r(0) \\ E_s(0) \end{pmatrix} = F(z) \begin{pmatrix} E_r(0) \\ E_s(0) \end{pmatrix} \quad (5)$$

$$F(z) = \begin{pmatrix} \cosh(\lambda z) - \frac{(\alpha + j\Delta\beta)\sinh(\gamma z)}{\gamma} & -j\kappa e^{j\Omega} \frac{\sinh(\gamma z)}{\gamma} \\ j\kappa e^{j\Omega} \frac{\sinh(\gamma z)}{\gamma} & \cosh(\lambda z) + \frac{(\alpha + j\Delta\beta)\sinh(\gamma z)}{\gamma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} \\ F_{21} & F_{22} \end{pmatrix} \quad (6)$$

ここで、 $\gamma = \pm \sqrt{\kappa^2 + (\alpha + j\Delta\beta)^2}$ である。

(5)、(6)式を用いて z 軸方向、すなわち共振器方向に任意の小分割を作成し、それら行列の掛け算で複雑な回折格子を有した実際の共振器を記述する。

半導体レーザーの発振条件は、共振器を構成する転送行列が自明な解をもつ条件での固有値解である。両端面に無反射(Antireflection: AR)コーティングを行った共振器で発振条件を解くと、しきい値利得が最小となる二つのモードが存在し、最低のモードのうち、どちらかを選択するかが決まらないため、DFBレーザーの発振確率が保証されない。これに対して、片端面の反射率を上げてへき開(Cleaved: CL)面とした共振器で発振条件を解くと図6の結果となり、発振確率が改善されることが知られている⁹⁾。図中の数字は正規化された結合係数 κL である。また、横軸は発振波長のブラッグ波長からのずれ、縦軸はしきい値利得である。結合係数を決めたとき、しきい値利得が最も小さい点が発振条件である。

また図6から、しきい値利得が最小になるモードと2番目にしきい値利得が小さくなるモードとの利得差はサイドモード抑圧比(Side Mode Suppression Ratio: SMSR)と呼ばれて、単一モード発振レーザー性能の重要なパラメーターである。結合係数が大きくなれば①しきい値利得が小さくなり、低しきい値レーザーとなる。他方、②SMSRは小さくなり、単一モード性が劣化する傾向がある。これらの観点から、性能仕様を満たすように κL を決めなければ

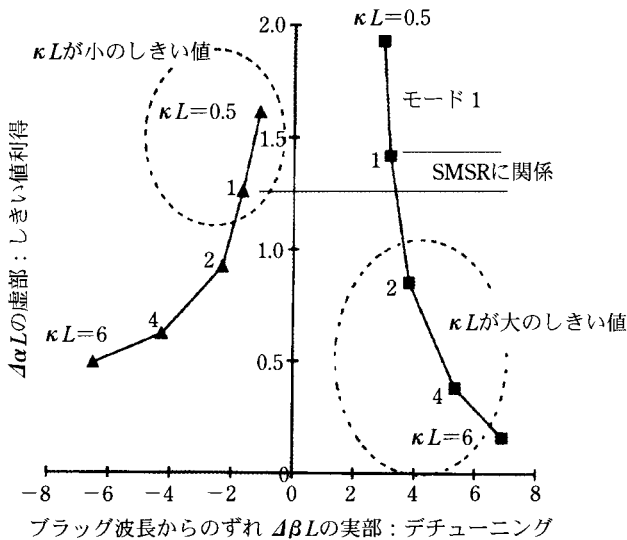


図6 DFBレーザの正規化結合定数(κL)を変化させたときのAR/CL構造でのしきい値条件⁹⁾. 数字は正規化された結合係数 κL である.

ばならない。

決められた κL を実現するためには、(1)式に基づき κL に対応する n_e を求めなければならない。 n_e は光導波路層の凸凹の平均値であり、埋め込み導波路の凸と凹の部分の光閉じ込めを通常はスカラーモードで計算し、その固有値が解となる。この解析はレーザの解析というよりも光導波路解析そのものである。

6. 最適化設計手法

実際に設計を行う場合には、目的に応じたツールを用いて、複数回のシミュレーションを組み合わせる。そして結果を判断し、入力値の修正を繰り返して最終の設計値に到達する。これには技術者の豊富な知識が要求される。特に光デバイスでは第2章に述べたような難しさがあるため、技術者の負担も大きいといえる。また設計は、製造装置、製造技術に依存したばらつきを含めた製造精度をも考慮する必要がある。これらに関する話題から、数値解析上の最適手法を利用した手法を、第5章の議論を発展する形で記す。

最適化は目的関数、 $f = \sum_i w_i (g(i) - g_i)^2$ を定義し、パラメータを入力して得られたシミュレーション値 $g(i)$ と設計目標値 g_i との差がなくなるように入力パラメータ i を決定することである。ここで、 w_i は目的関数の感度を調整するための重みづ

けである。最適化手法に関しては、最急降下法や遺伝的アルゴリズムなど多くの報告がある⁹⁾。問題に応じて、安定性、高収束性の観点からアルゴリズムを選ぶことがポイントである。

DFBレーザの発振確率を理論的に保証するために共振器に $\lambda/4$ の位相シフトを導入する設計では、回折格子の結合定数 κL にも依存するが、一般的には図1(b)に記したように、光強度は位相シフト付近で強くなる。この強度が集中している領域でキャリアが多く消費され、供給が追いつかず空間的にキャリア不均一が生じる。これを空間的ホールバーニング (Spatial Hole Burning: SHB) と呼び、レーザの共振器が理想系からずれ、直接変調特性、SMSR、高出力特性、スペクトル線幅などに影響を与えることが知られている。

ここで、DFBレーザの発振確率を保証しながら、回折格子を工夫することで共振器方向に光強度分布を平坦にすることを設計目標として設定する。この目標を実現するために、どのように回折格子を設定すれ

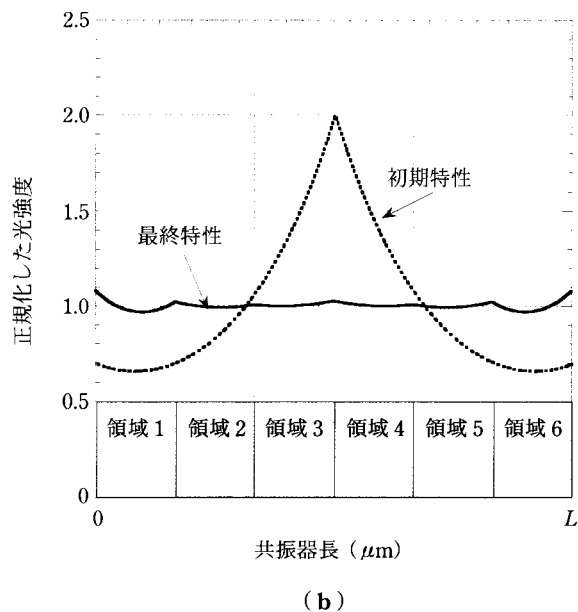
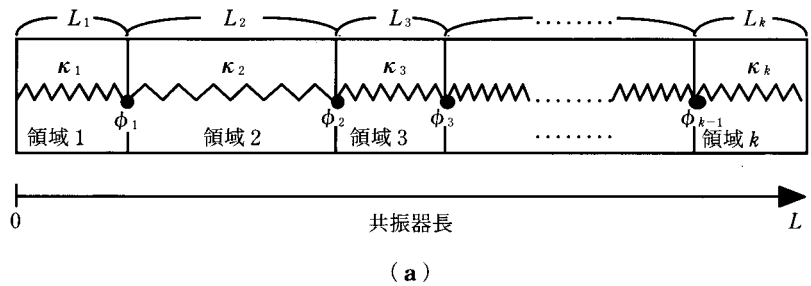


図7 光強度分布を共振器内で平坦化する κL の設計。(a)共振器方向の結合定数、位相の分布の模式図。 L は共振器長、 κ は結合係数、 ϕ は位相シフトを示す。(b)共振器を6領域に分割し、光強度分布を平坦化した例(黒:初期値、赤:最終値)。

ばよいかという問題になる。

すなわち、図7(a)に示したように、回折格子の正規化結合定数 κL 、位相調整を場所依存で製造可能性を念頭に置き設計することになる。ここでは、中央に $\lambda/4$ 位相シフトを入れ、分割は6領域、左右対称構造とした。領域ごとの $\kappa_i L$ を変化させて共振器方向の光強度を算出し、目的関数に反映させて $\kappa_i L$ の最適化を行った。図7(b)は共振器方向の光強度分布を、初期値と最終値に対して示したものである。初期値は $\kappa_i L = 2 (i=1\sim 6)$ であり、最終値は、 $\kappa_1 L = \kappa_6 L = 2.18$, $\kappa_2 L = \kappa_5 L = 0.65$, $\kappa_3 L = \kappa_4 L = 0.24$ であった。最終解を得るまでに反復はおおよそ20回程度であった。

光は領域ごとに上記の回折格子を感じるようにすればよく、光を感じない回折格子をダミーで設定するなどして、エッチング特性などの制御性が上がるなど工夫して製造を行うことができる。誌面の制約上割愛するが、最適化手法は実測値とシミュレーション値を比較して、加工精度評価として利用することも可能である。

このように、ツールを使い分けて設計業務を効率化することで、かなり高度な設計も相関関係をよく理解して、順序だてて行うことができる。

7. お す び

半導体レーザーのシミュレーションは一つのツールでは難しく、目的に応じたツール群が必要であることがわかる。

そして、個々のツールは物理に根ざし、現実解として工学を受け入れ、実際の生産活動にきわめて重要な貢献をしている。

文 献

- 1) <http://www.noah-c.com/pdf.files/alds.pdf>
- 2) W. W. Chow, S. W. Koch and M. Sargent III: *Semiconductor-Laser Physics* (Springer-Verlag, Berlin and Heidelberg, 1994).
- 3) A. R. Adams: *Electron. Lett.* **22**, 249 (1986).
- 4) 横山清行: 電子情報通信学会誌 **82**, 592 (1999).
- 5) S. Seki and K. Yokoyama: *IEEE Photon. Technol. Lett.* **10**, 200 (1998).
- 6) S. L. Chung: *Physics of Optoelectronic Devices*, Chap. 4 (John-Wiley and Sons, New York, 1995).
- 7) 西 謙二: 応用物理 **71**, 588 (2002).
- 8) G. Morthier and P. Vankwinkelberge: *Handbook of Distributed Feedback Laser Diodes* (Artech House, Boston, 1997).
- 9) 例えば、長尾智晴: 最適化アルゴリズム (昭晃堂, 2000).
(2002年6月25日 受理)



よこやま 清行
横山 清行

1976年大阪大学大学院修士課程修了。日本電信電話公社(現在、NTT)の研究所にて、Siや化合物半導体デバイスモデリングの研究に従事。85年イリノイ大学 Visiting Scholar, NTTで光デバイスモデリングの研究に従事。99年(有)ノア コンサルティング設立、取締役社長。工学博士。