修士論文

THz 波発振に向けた MOVPE 法による 窒化物共鳴トンネルダイオードの製作、解析 Fabrication and analysis of nitride resonant tunnelling diodes by MOVPE for THz oscillation



指導教員 中野 義昭 教授 東京大学大学院 工学系研究科 電気系工学専攻 37-126425 伊藤 成顕

2014年2月6日

目次

第1章	序論	1
1.1	はじめに	1
1.2	テラヘルツの応用領域	1
1.3	テラヘルツ光源の種類と特徴・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	5
1.4	RTD の高周波発振	8
第2章	研究の背景理論	13
2.1	量子井戸中の波動関数	13
2.2	シュレーディンガー方程式のシミュレーション	15
2.3	サブバンド間の光吸収に関する理論	17
2.4	サブバンド間の電子散乱に関する理論..............................	21
2.5	窒化物の分極	28
2.6	ポアソン方程式によるバンド構造のシミュレーション	31
2.7	2 重障壁ダイオードのトンネル電流に関する理論	34
2.8	共鳴トンネルダイオードを用いた高周波の発振原理	37
第3章	実験原理および実験手法	41
3.1	有機金属結晶成長法 (MOVPE 法)	41
3.2	X 線回折法 (XRD)	42
3.3	原子間力顕微鏡 (AFM)	44
3.4	フーリエ変換赤外分光法 (FTIR)	45
3.5	ホール測定	46
3.6	伝送線モデル法 (TLM 法)	48
第4章	量子井戸ナノ構造の結晶成長およびメサ構造試料作製プロセスの確立	50
4.1	GaN/AlGaN 量子井戸構造の結晶成長	50
4.2	GaN キャップ層の結晶成長	53
4.3	窒化物のドライエッチング....................................	54
4.4	蒸着する金属の種類	57
第5章	RTDの特性評価と課題抽出	59
5.1	共鳴トンネルダイオードの作製プロセス評価	59
5.2	共鳴トンネルダイオードの IV 特性	60

目次		ii
5.3	実験結果の考察と作製面での課題	62
第6章	ISBT を用いた量子井戸の結晶成長評価と共鳴トンネルダイオード特性の解析	67
6.1	サブバンド間エネルギー準位のシミュレーション	67
6.2	ISBT の吸収スペクトルのシミュレーションと量子井戸幅の分散	70
6.3	共鳴トンネルダイオードの解析	73
第7章	結論	74
付録 A	Appendix A	76
A.1	電子格子相互作用の遷移確率に関する式変形	76
付録 B	Appendix B	80
B.1	窒化物の物性定数	80
参考文献		81

謝辞

第1章

序論

1.1 はじめに

電磁波が発見されて以来、現在に至るまで電磁波は様々な形で研究をされてきた。iPhone やスマート フォンなどで用いられている無線通信がその一例にあたる。その中でも、近年、粒子としての性質が強い 光と波としての性質が強い電波の中間の領域であるテラヘルツ帯 (0.3THz~3THz) は現在でも未開拓の 周波数領域となっており、最も基本的な要素となる発振・増幅デバイスでさえ満足できるものは開発され てないのが現状である。ところが、このテラヘルツ帯は未開拓にも関わらず、その波長帯は生命科学、物 性物理、薬品検出等で重要となってくる分光分析や、非破壊検査で重要となるイメージング、さらには赤 外線天文学など広範囲の応用分野が期待されている。そこで、本研究では小型で室温発振が可能な共鳴ト ンネルダイオードを用いた THz 光源に向けて研究を進めた。



図 1.1 THz の周波数領域

1.2 テラヘルツの応用領域

この節では、テラヘルツ帯の応用分野について説明する。テラヘルツ帯の電磁波が広く応用される理由として、以下の基本的な性質を持っていることが挙げられる。

- 分子内振動に相当するエネルギー(分子の種類と量)
- 水素結合など、分子の弱い相互作用に敏感なので、水に強く反応する
- テラヘルツは長波としての波の性質も持っているので、物質透過性があるにも関わらず、X線のような短波でないので、人体に対して安全である
- 光に対して長波なので、散乱されにくい。

そこで、今回、テラヘルツ帯の応用例として

- 1. テラヘルツイメージング
- 2. テラヘルツを用いた高速無線通信
- 3. テラヘルツを用いた天体観測

について説明する

1.2.1 テラヘルツイメージング



図 1.2 電磁周波数と水の吸収係数

テラヘルツを用いたイメージングに関して、水の吸収スペクトルが重要な一つの要素となっている。図 1.2 に示すような電磁周波数と水の吸収係数の相関から、テラヘルツ帯は可視光に比べて、6 桁以上水に 敏感であることがわかる [1]。テラヘルツ帯が水に敏感であるため、水分を多く含むような新鮮な食物か どうかを判別することが出来る。

例えば、図 1.3(a) の左の葉っぱでは採れたての新鮮な葉っぱなので、水分を多く含んでいるが、採れてから4時間後の図 1.3(a) の右の葉っぱでは水分を多く含んでいないことがわかる [2]。これは葉っぱだけでなく、あらゆる生物で内部構造の水分量を探索できるので例えば、図 1.3(b) のような食物の内部に水分がどれだけ含まれているか観測することができ、食の安全性に関して、一つの定量的基準を設けることが出来るのではないかと期待されている。

また、テラヘルツの被服や紙などに対する優れた透過性を用いて、図 1.3(c) のように紙や服で隠されたナ イフや拳銃などを非接触イメージングすることが出来る。そこで、テラヘルツ光源を用いて、空港での X 線を用いない、安全な全身スキャンによるセキュリティ検査が期待される [3]。

テラヘルツのイメージングとして最後に薬物のテラヘルツ検査について述べる。現在我が国で最も乱 用されている覚せい剤であるメタンフェタミン (ヒロポン)、および世界的に乱用されている合成麻薬 MDMA(di-メチレンジオキシメタン、エクスタシー)、そしてアスピリンをテラヘルツで分光したところ、 図 1.3(d) のようになった [4]。

この薬物を検出できた原理として、薬物に対する THz 吸収スペクトルを考えなければならない。テラヘ



図 1.3 (a) テラヘルツを用いた新鮮な葉の検査 (b) エビ内部の水分検査 (理研・ニコン) (c) 隠匿物検 査の例 (d) 封筒内の禁止薬物探知の例



図 1.4 (a) 薬物の吸収スペクトル (b) 合成繊維の吸収スペクトル (岩手県立大学) (c)DNA および RNA の塩基の吸収スペクトル (TOHOKU UNIV. & SEMICONDUCTOR RESEARCH INSTITUTE)

ルツの薬物に対するスペクトルは図 1.3(a) のようになっており、メタンフェタミンは 1.2THz、アスピリン、MDMA は 1.4THz 付近にピークが存在する。この吸収度の差から三種の薬物を判別することができる。また、図 1.3(a) からわかるように、THz より長波では透過率が 100% に近づき、THz より短波では

ほとんど透過出来なくなる。つまり、このような薬物を一つの周波数帯のスペクトル分光を用いて検査す るにはテラヘルツが最適であるこおがわかる。また、薬物以外でも図 1.3(b) のような合成繊維ではポリ エステルが 5.5THz 付近、アクリルが 4THz 付近、ナイロンが 2THz 付近に吸収ピークが存在し、他の繊 維と識別できることがわかる。他にも図 1.3(c) のように、DNA および RNA の塩基でもテラヘルツ帯で 区別できることがわかる。

1.2.2 テラヘルツを用いた高速無線通信

近年、図 1.5 で示されているように、無線を用いた情報伝送需要の急増や電波利用の拡大により、既存 の無線通信に割り当てられている周波数帯ではネットワークが使用できなくなる可能性が出てきた。そこ



図 1.5 データ通信速度のロードマップ [5]

で、最近、世界的に周波数分配が行われていない 275GHz~370GHz のテラヘルツ帯を用いて、毎秒数十 Gbps 級の超高速伝送を可能とする高速大容量無線技術が研究されている。テラヘルツ帯通信の特徴とし て、次の点が挙げられる。

- 1. テラヘルツ帯は、他の周波数帯と比較して図 1.6(a) に示すように、伝搬損失の要因が大気吸収に大 きく依存する。
- 2. 干渉を回避しやすく、広い帯域を使うことで簡単な変調方式を用いてデバイスコストを下げら れる。
- 3. 図 1.6(b) のように、波長が長ければ長いほど伝搬距離が長くなってくるので、テラヘルツは 10m 程度の近距離通信に向いている。

他の周波数帯での近距離無線通信と比較し、テラヘルツ通信の位置づけを示したものが表 1.1 のように なっている。

1.2.3 テラヘルツを用いた天体観測

近年、惑星・星間科学を目的としてテラヘルツを用いた天文観測が研究されている。星間科学の分野で は ALMA や SOFIA、そして最近日本から打ち上げられた赤外線観測衛星「あかり」はサブミリ波、テ ラヘルツ光をターゲットとするものであり、分子の回転運動において、エネルギーの高い準位から低い準



図 1.6 (a) 大気吸収の周波数依存性 (b) 無線伝搬可能距離の周波数依存性 [6]

	マイクロ波	ミリ波 (60GHz)	テラヘルツ	赤外光
伝送容量	$0.2 \sim 1.5 \text{Gb/s}$	$1.5 \sim 7 \mathrm{Gb/s}$	$10{\sim}100\mathrm{Gb/s}$	100Mb/s
アンテナの サイズ	10mm	数 mm	$0.5\mathrm{mm}$	数十 μm
応用事例	Wifi	WirelessHD	非圧縮伝送	携帯端末の データ転送
コスト	安価	安価になる可能性 (Si-CMOS 技術)	安価になる可能性 (アンテナ技術集積化)	安価

表 1.1 他の近距離無線通信との比較

位に遷移する際に放出するテラヘルツの観測から星間空間における分子進化の過程が解明されることが期 待されている。

一方で、テラヘルツ分子分光は地球科学でも非常に重要である。たとえば地球大気における最も主要な温 室効果ガスは、テラヘルツ領域に強い吸収帯を持つ水蒸気であり、地球の温室効果の 60% を占めると言 われている。従って、その吸収断面積を調べることは地球の熱収支を見積もる上で極めて重要である。テ ラヘルツ領域における衝突による圧力広がりや圧力シフトに関しては、信頼できる測定値が不足してお り、データの収集に期待されている。

1.3 テラヘルツ光源の種類と特徴

現在までに様々な THz 発振器が実現されており、大まかにのコヒーレントな電磁波を放出する THz 発振器と広帯域な電磁波を放出する THz 発振器に分けられる。

THz の光源、発振器として例を示すと、表 1.2 のように様々なものが存在する。図 1.7 に示してあるように、その中でも小型の固体素子で THz のすべての領域を室温発振できるのではないかと期待されているのが RTD である。例えば、自由電子レーザーは 100W 以上の高出力であるが、大きさが数十 m にもなってしまい、p-Ge Laser や QCL は小型の素子で発振できるが、低温にしなければいけない。

そこで、この節では固体発振器として、IMPATT diode と Tunnet diode、Gunn diode、共鳴トンネル ダイオード (Resonant-Tunneling Diode: RTD)、コヒーレント光源として、自由電子レーザー、量子カ スケードレーザー、光伝導スイッチ、p-Ge レーザーの THz 発振の発生原理、装置特徴、動作原理、応用 分野などを述べる。

	単一波長型	広帯域型
固体発振器	Gunn diode IMPATT diode RTD	なし
レーザー	CO ₂ レーザー p-Ge レーザー 量子カスケードレーザー	なし
光エレクトロニクス	光混合 光パラメトリック発振 差周波発生	パルスレーザーによる 光伝導スイッチ
熱放射型	なし	黒体炉 グローバー 高圧水銀灯
電子ビーム、電子管	ジャイロトロン クライストロン 自由電子レーザー	シンクロトロン放射光

表 1.2 THz の主な光源、発振器



図 1.7 THz 帯の主な光源、発振器の出力

1.3.1 IMPATT diode, Tunnet diode

IMPATT、TUNNET 共に走行時間効果を用いたダイオードであり、IMPATT は 1958 年に WT.Read らによって [7]、TUNNET は同年に J.Nishizawa らによって提案された [8]。現在、最高周波数は 650GHz で出力は-70dBm 程度である [9]。これらの発振限界はキャリアの走行距離によって決定し、例え ば IMPATT の発振周波数は v を電子の走行距離、W を走行層の距離である。例えば、Si の場合、300K における飽和速度は $v = 10^7 cm/s$ であり、1THz の発振周波数ならおおよそ 50nm 程度まで薄くしなけ ればならない。

1.3.2 Gunn diode

高電界を印加すると、電子の移動度が小さくなるために負性抵抗が生じることを利用した素子であり、 1963 年に J.B.Gunn らによってマイクロ波を発生させることに成功した [10]。現在、Gunn diode で発 生出来た THz 帯の最高周波数は 315GHz である [11]。

1.3.3 RTD

共鳴トンネル効果による負性抵抗を用いた素子であり、1984年に初めて T.C.L.G. Sollner らによって、200K で 18GHz の発振に成功している [12]。現在、S. Suzuki らによって室温で 1.42THz で 1 μ W 程度の発振に成功しており、室温 THz 発振を実現する唯一の電子デバイスとなっている [13]。

1.3.4 自由電子レーザー

加速された電子ビームを周期的に電磁場を印加することによって、レーザー発振させたものが自由電子 レーザー (Free Electron Laser: FEL) である [14]。現在、可視光から 120GHz までの幅広い周波数帯の レーザーを出力出来るが、電子ビームを加速させるため、巨大な装置が必要となる。

1.3.5 量子カスケードレーザー

半導体超格子構造によって発生するサブバンド間遷移を用いたレーザーを量子カスケードレーザー (Quantum Cascade Laser: QCL)と呼ぶ。1971年に初めて R.F.Kazarinovらによって提案され [15]、 1994年に J.Faistらによって初めて 4.2µm(71.4THz)、10K で発振した [16]。さらに、1995年には J. Faistらによって液体窒素温度での連続発振 [17]や同年に、室温でのパルス発振に成功している [18]。ま た、最近、A. Wadeらによって 31Tという強磁場を印加することで、1THzを高温発振 (215K)させる ことに成功している [19]。近年発展が目覚ましい量子カスケードレーザーであるが、THz 領域では低温 や強磁場といった特殊な状況に置かないと発振できず、未だ THz 領域での室温発振には至っていないた め、発光素子自体は小さいが、全体的な装置としては巨大なものを要する。

1.3.6 光伝導スイッチ

1984年に初めて D.H.Auston らによって超短パルスレーザーを用いた光伝導電流の THz 発振が提案 された [20]。構造は高速応答する半導体基板(低温成長 GaAs、イオン注入 Si など)の上に平行伝送線路 とそれに接続するアンテナからなり、原理としては、半導体のバンドギャップよりも大きなエネルギーを 持ったレーザーパルスを照射すると半導体中に電子と正孔の自由キャリア対が生成され、光伝導電流がサ ブピコ秒で変調されることに対応して、THz 帯のパルス状電磁波を放射する仕組みとなっている。発生 の過程と逆過程で受光素子ともなることから時間領域の THz 分光法として応用できることが期待されて いる。しかし、光伝導スイッチ自体は小型であるが、超短パルスレーザーを使用しなければいけないの で、発生装置全体としては大型になってしまう。

1.3.7 p-Ge レーザー

1982 年に初めて S.Komiyama によって提案された [21]。P型 Ge 半導体を用いて、強磁場中で Ge の ホールが加速されサイクロトロン運動し、価電子帯の中で発光する。磁場によって自由に波長を変化さ せることが出来るが、原理的に極低温でしか動作出来ないため、p-Ge レーザーも全体では大型の装置と なってしまう。

以上の THz 発信源の特徴をまとめると、表 1.3 のようになる。

THz 発信源	THz 帯領域	サイズ	出力	室温動作	連続発振
IMPATT, TUNNET	×	0	\triangle	0	0
Gunn	×	0	\bigtriangleup	0	0
RTD	0	0	\triangle	0	0
FEL	0	×	0	0	\bigtriangleup
QCL	0	×	0	×	\bigtriangleup
光伝導スイッチ	0	×	0	×	×
p-Ge Laser	0	×	0	×	\bigtriangleup

表 1.3 THz 発信源の比較表

1.4 RTD の高周波発振

1.4.1 RTD の動作原理と歴史

図 1.8 のような電圧の増加に対し電流が減少する特性,いわゆる (負性性抵抗特性 (Negative Differential Resistance: NDR)) は発振回路の重要な構成要素であり、多くの研究がなされてきた。その中でも、高 周波でよく用いられる共鳴トンネルダイオードは、1973 年に IBM Thomas Watson 研究所の Raphael Tsu 博士と江崎玲於奈博士が提案した量子効果に基づく、二端子の半導体素子であり [22]、1974 年に初 めて L. L. Chang らによって低温で微分負性抵抗が確認できた [23]。

共鳴トンネルダイオードの構造は、図 1.8 に示すように、厚さ数 nm の薄い障壁層で量子井戸層を挟んだ 構造となっている。通常、障壁層、量子井戸層の走行部分をアンドープし、走行部分のみで電圧が加わる よう、工夫している。動作原理としては電圧を徐々に加えていくと、一方のフェルミエネルギーが持ち上 がり、さらに電圧を印加するとフェルミエネルギーが量子井戸層で生じるサブバンドエネルギー準位と一 致し、電流が多く流れ始める。さらに電圧を加えると、伝導帯の底がサブバンドエネルギーよりも高くな り、電流が減少する。この電圧領域が負性抵抗特性の現れる領域となる。また、さらに大きな電圧を印加 すると、より高いサブバンドエネルギー、および連続準位で電子がトンネリングするようになるので、負 性抵抗特性が消滅し、また電流が単調増加するようになる。

共鳴トンネルダイオードの最も重要な特徴である高速な動作速度は、量子力学的なトンネル時間と回路的 な充電時間によって決まる。トンネル時間は量子力学的に電子が二重障壁をトンネルするのに必要な時間 で、障壁厚さと高さが小さいほど小さくなる。これには PVR(=*I*_{peak}/*I*_{valley}) とのトレードオフが存在 するが、構造によっては 0.1ps 以下の値が得られる。これに対し、充電時間は RTD のもつ寄生容量を充



図 1.8 負性抵抗特性の概略図 [24]

電するために必要な時間である。RTD の基本部分はコンダクタンスと寄生容量の並列接続でモデル化で き、最小の充電時間はピーク電流でこの容量を充電する時間と考えられる。RTD の動作速度はこの両者 の関数となる。

1983年には T. C. L. G. Sollner らによって低温で AlGaAs/GaAs/AlGaAs 二重障壁 RTD で 2.5THz における検波に成功した [25]。この結果から、量子井戸内の走行時間は 100 フェムト秒程度であると見積 もられた。1984年には同グループによって RTD で 200K で 18GHz の発振を初めて観測した。1985年 に T.J.Shewchuck らにより AlGaAs/GaAs/AlGaAs 二重障壁 RTD で初めて室温発振を確認した [26]。 1987年には E.R.Brown らにより初めてミリ波発振に成功した [27]。その後、同グループによって導波 管を用いて InAs/AlSb/InAs 二重障壁 RTD で 712GHz の高周波が実現されている [28]。現在では現 在、S. Suzuki らによってスロットアンテナ構造の AlAs/GaInAs/AlAs 二重障壁 RTD を用いて室温で 1.42THz で 1 μ W 程度の発振に成功している [13]。

1.4.2 RTD に使われる半導体材料の比較

現在までに高周波を出力出来ている共鳴トンネルダイオードに関して、表 1.4 のように様々な材料が存 在している。

Si/Ge	GaAs/AlAs	InAs/AlSb	InGaAs/AlAs	GaN/AlGaN		
648GHz[29]	420GHz[27]	712GHz[28]	$1.42 \mathrm{THz}[13]$	300GHz 以上が可能 (理論上)[35]		

表 1.4 共鳴トンネルダイオードに使われる材料系

共鳴トンネルダイオードとして用いる際、材料系の選択において、トンネル時間に関係のある障壁層と井 戸層の伝導帯オフセット (Conduction-Band Offset: CBO)、および充電時間に関係のある共鳴トンネル ダイオードの寄生容量といった二つ重要なパラメーターが存在する。

様々な材料の CBO を示したものが図 1.9 である。



図 1.9 (a) 様々な材料系の伝導帯オフセット (b) 二重障壁の透過率

この図 1.9(a) から窒化物系の CBO は他の材料系と比較して非常に高いことがわかる。これは高周波を 出力する共鳴トンネルダイオードに有利であり、図 1.9(b) に示すように、伝導帯オフセットが大きいほ ど半値幅のエネルギーは大きく PVR が大きい。半値幅 Г(eV) に対して、ハイゼンベルグの不確定性原理 より

$$au_{RTD} \sim \hbar/\Gamma$$

となる。ここで、RTD の寄生容量 C_{RTD} は

$$C_{RTD} \simeq (\tau_{RTD} + \tau_{dep}) G_{RTD}$$

と見積もられるため、半値幅は大きい方がより寄生容量は小さくなる。

また、空乏層走行時間 Tdep は

$$\tau_{dep} = d_{dep}/v_s$$

と表される。ここで、*d_{dep}*は空乏層幅、*v_s*は電子の飽和速度を表している。 RTDの蓄積層と空乏層の間に生じる静電容量から、RTDの障壁の静電容量、井戸部の静電容量を削除し て空乏層幅は次のように表される [30]。

$$d_{dep} = \epsilon_0 \epsilon_{well} S_{mesa} \left(\frac{1}{C_0} - \frac{2d_{barrier}}{\epsilon_0 \epsilon_{barrier} S_{mesa}} - \frac{d_{well}}{\epsilon_0 \epsilon_{well} S_{mesa}} \right)$$

ただし、 C_0 は RTD 空乏層による静電容量、 d_{well} は RTD の障壁層の厚さ、 $d_{barrier}$ は RTD の井戸層の 厚さとなっている。この空乏層幅はスペーサーが数 nm 程度で 10~20nm となる。

このことから空乏層走行時間は $\epsilon_{well}/\epsilon_{barrier}$ が大きく、また v_s の大きい方が良い。表 1.5 に示すよう に、電子飽和速度は半導体材料によって大きく依存している。

材料	Si	GaAs	InAs	SiC	GaN/AlGaN
飽和電子速度 (cm/s)	1.0×10^7	$1.3 imes 10^7$	3.51×10^7	2×10^7	$2.7 imes 10^7$

表 1.5 様々な材料系の電子飽和速度

GaN は InAs の次に電子飽和速度が速く、高周波デバイスとして向いていることがわかる。

1.4.3 窒化物の共鳴トンネルダイオード

GaN は THz 帯の高周波、高出力を発振できる共鳴トンネルダイオードとして期待されていることを説 明した。そこで、GaN の共鳴トンネルダイオードに関して現在までに共鳴トンネルダイオードとして動 作してきたものについて述べる。

2001 年、Kikuchi らによって窒化物の AlN/GaN の MQW を用いて初めて PVR が 10 程度のものを観 測した [31]。ところが、2003 年に、電圧を 0V からある電圧まで徐々にスイープした場合と、ある電圧 から 0V まで徐々にスイープした場合では異なる結果が出るという報告があり、これはキャリアトラッ プによるものではないかと指摘している [32]。さらに、2006 年に、Golka らによって、GaN/AlGaN の 二重障壁 RTD を用いて、初めて室温で PVR が 2 程度の共鳴トンネルダイオードが制作された。2010 年には Bayram らによって初めて GaN/AlGaN の二重障壁 RTD を GaN 基板の上で観測することが出 来た [33]。さらに、同年、Zainal らによって初めて閃亜鉛型構造の GaN を用いることで、非極性面で GaN/AlGaN の二重障壁 RTD による負性抵抗特性の観測に成功した [34]。また、同年、MOVPE 法に よって初めて GaN/AlN の二重障壁 RTD で負性抵抗を観測することが出来た。そして、2011 年、Lin'an らによって、格子欠陥密度が 5×10⁸ cm⁻² という高い欠陥でも、300GHz という THz 帯で発振出来る可 能性があることを実験データを基にシミュレーションした [35]。

1.4.4 本研究の目的

以上の背景を踏まえて、本研究では「THz 発振に向けて、MOVPE 法によって窒化物を用いた共鳴ト ンネルダイオードを製作し、シミュレーションを行い、MBE 法では考えられなかった MOVPE 法の結 晶成長特有の問題点を考えること」を研究目的として据えいる。 そのために、本研究では以下のステップを考えた。

- 1. 共鳴トンネルダイオードを製作するための結晶成長技術、プロセスの確立
- 2. 共鳴トンネルダイオードの特性測定
- 3. ISBT を用いた結晶成長評価法の確立

4. 結晶成長評価を考慮した共鳴トンネルダイオードのシミュレーション

そこで、本論文の構成として第二章で実験の考察、シミュレーションで必要となる理論を述べ、第三章で は実際に行った実験手法の原理および理論を説明する。第四章では共鳴トンネルダイオードを作製するた めの結晶成長の確立およびプロセスの確立に対する考察をしていく。第四章では実際に製作した共鳴トン ネルダイオードの測定結果を示し、それに対する考察をした。第五章では ISBT を用いた新しい結晶成長 の評価法を説明し、第六章では第五章の結果を踏まえた上で共鳴トンネルダイオードのシミュレーション 結果について述べ、考察した結論と今後の課題について第七章で説明する。

第2章

研究の背景理論

本章ではまず量子井戸結晶成長の新たな定量的評価基準として界面急峻性や全体の井戸幅分散などを導入するために GaN/AlGaN 量子井戸の ISBT を用いた光吸収特性の理論、さらに励起された電子の緩和 特性理論について述べる。また、GaN/AlGaN 量子井戸の ISBT を用いた光吸収において、どのように 結晶成長の効果が効いてくるかについて、理論的な検証を行う。

2.1 量子井戸中の波動関数

この節では単一電子のシュレーディンガー方程式、井戸層と障壁層の境界条件等について議論してい く。波動関数を $\psi(\mathbf{r}, t)$, ハミルトニアンを H として、時間依存のシュレーディンガー方程式は以下のよ うに表される。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi\left(\boldsymbol{r},t\right) = H\psi\left(\boldsymbol{r},t\right)$$
(2.1)

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r}, t)$$
(2.2)

Hが時間依存性無い場合、変数分離法によって $\psi(\mathbf{r},t) = f(t)\varphi(\mathbf{r})$ とすると、

$$H\varphi\left(\boldsymbol{r}\right) = E\varphi\left(\boldsymbol{r}\right) \tag{2.3}$$

となる。ただし、 φ は固有値 *E* に対応した固有ベクトルである。ところで、ブロッホの定理によると、周 期構造である半導体に関して、 Γ 点の ψ (\mathbf{r} , t) は材料の結晶構造によって異なるブロッホ関数 u (\mathbf{r}) を用 いて、次のように表される。

$$\psi_n(\mathbf{r},t) = f_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) u(\mathbf{r}) \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right)$$
(2.4)

ただし、 E_n は量子数 n のエネルギー固有値、 $f_n(\mathbf{r})$ は包絡関数である。 $f_n(\mathbf{r})$ はバンド図、すなわち量 子井戸構造によって変化する。

ここで、量子井戸の積層方向を z 軸、xy 平面を自由空間として波数ベクトルを $\mathbf{k} = (k_x, k_y, 0)$ として

$$f_{n,\boldsymbol{k}}\left(\boldsymbol{r}\right) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \phi_{n}\left(z\right)$$
(2.5)

と表される。ここで、Aはxy平面の面積である。z方向のみにポテンシャルがあるとして、 $V(\mathbf{r}) = V(z)$ とすると、式 (2.3)、(2.4)、(2.5)より

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi_n\left(z\right)\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2}\right)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{\hbar^2}{2m}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\frac{d^2}{dz^2}\phi_n\left(z\right) + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}V\left(z\right)\phi_n\left(z\right) = E_{n,\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\phi_n\left(z\right) \quad (2.6)$$

zとx,yの変数に変数分離できるので、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}\phi_n(z) + V(z)\phi_n(z) = E_n\phi_n(z)$$
(2.7)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} \right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = E_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$
(2.8)

となる。

故に、xy 平面を完全な自由空間であると仮定して、全体のエネルギーは

$$E(n, \mathbf{k}) = E_n + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$$
(2.9)

となる。また、半導体には材料特有の結晶中の粒子群のみかけの質量である有効質量 m* があり、

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \tag{2.10}$$

と表される。ここで、井戸層と障壁層など、異種の材料によるヘテロ界面の境界条件として確率密度が連 続であるので、

$$\lim_{\epsilon \to 0} \phi_n \left(z_{AB} - \epsilon \right) = \lim_{\epsilon \to 0} \phi_n \left(z_{AB} + \epsilon \right)$$
(2.11)

となる。

また、図 2.1 のように異種材料によるヘテロ界面のポテンシャルを考えると、シュレーディンガー方程式



図 2.1 異種材料によるヘテロ界面のポテンシャル

を $z = z_{AB}$ 含む非常に小さい区間 $(x_1 - \epsilon, x_1 + \epsilon)$ で積分すると、

$$\frac{1}{m_B^*}\frac{d\phi_n\left(z_{AB}+\epsilon\right)}{dz} - \frac{1}{m_A^*}\frac{d\phi_n\left(z_{AB}-\epsilon\right)}{dz} = -\frac{2}{\hbar^2}\int_{z_{AB}-\epsilon}^{z_{AB}+\epsilon} \left(E_n - V\left(z\right)\right)\phi_n\left(z\right)$$
(2.12)

式 (2.12) の右辺の積分に関して、被積分関数は有界なので、 $\epsilon \rightarrow 0$ の極限をとると、右辺は0になる。よって、

$$\lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{m_A^*} \frac{d\phi_n \left(z_{AB} - \epsilon \right)}{dz} = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{m_B^*} \frac{d\phi_n \left(z_{AB} + \epsilon \right)}{dz}$$
(2.13)

がヘテロ界面の境界条件として成立することがわかる。

2.2 シュレーディンガー方程式のシミュレーション

この節では前節で述べたような量子井戸構造の包絡関数に関するシュレーディンガー方程式を数値解析 的に解く方法を述べる。ヘテロ接合によって有効質量が変化することも考慮した包絡関数 ϕ_n のシュレー ディンガーは以下のようになる。

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{m^*\left(z\right)}\frac{\partial}{\partial z}+V\left(z\right)\right)\right\}\phi_n\left(z\right)=E_n\phi_n\left(z\right)$$
(2.14)

ここで、図 2.2 のように、包絡関数が直線と近似できるほど、十分小さな領域 & で分割することを考え



図 2.2 微小領域のポテンシャルの概略図

る。このとき、青色の領域でシュレーディンガー方程式を積分すると、右辺に関して

$$\begin{split} &\int_{\frac{z_{i}+1+z_{i}}{2}}^{\frac{z_{i}+1+z_{i}}{2}} \left\{ -\frac{\hbar^{2}}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^{*}(z)} \frac{\partial}{\partial z} + V(z) \right) \right\} \phi(z) \, dz \\ &\sim \left[-\frac{\hbar^{2}}{2m^{*}(z)} \frac{\partial \phi(z)}{\partial z} + V_{i} \phi_{i} z \right]_{\frac{z_{i}+z_{i-1}}{2}}^{\frac{z_{i}+1+z_{i}}{2}} \left(\because z \in \left[\frac{z_{i-1}+z_{i}}{2}, \frac{z_{i}+z_{i+1}}{2} \right] \Rightarrow V(z) \sim V_{i}, \phi(z) \sim \phi_{i} \right) \\ &= \left(-\frac{\hbar^{2}}{2\left(\frac{m^{*}_{i+1}+m^{*}_{i}}{2} \right)} \frac{\phi_{i+1}-\phi_{i}}{z_{i+1}-z_{i}} + \frac{\hbar^{2}}{2\left(\frac{m^{*}_{i}+m^{*}_{i-1}}{2} \right)} \frac{\phi_{i}-\phi_{i-1}}{z_{i}-z_{i-1}} \right) + V_{i} \phi_{i} \left(\frac{z_{i+1}+z_{i}}{2} - \frac{z_{i}+z_{i-1}}{2} \right) \\ &= -\frac{\hbar^{2}}{m^{*}_{i+1}+m^{*}_{i}} \frac{\phi_{i+1}-\phi_{i}}{\epsilon} + \frac{\hbar^{2}}{m^{*}_{i}+m^{*}_{i-1}} \frac{\phi_{i}-\phi_{i-1}}{\epsilon} + V_{i} \phi_{i} \epsilon \left(\because \epsilon = z_{i+1}-z_{i} = z_{i}-z_{i-1} \right) \\ &= -\frac{\hbar^{2}}{\epsilon} \frac{1}{m^{*}_{i+1}+m^{*}_{i}} \phi_{i+1} + \left\{ \frac{\hbar^{2}}{\epsilon} \left(\frac{1}{m^{*}_{i}+m^{*}_{i+1}} + \frac{1}{m^{*}_{i}+m^{*}_{i-1}} \right) + V_{i} \epsilon \right\} \phi_{i} - \frac{\hbar^{2}}{\epsilon} \frac{1}{m^{*}_{i}+m^{*}_{i-1}} \phi_{i-1} \end{split}$$

また、シュレーディンガー方程式の右辺は以下のようになる。

$$\int_{\frac{z_{i+1}+z_{i}}{2}}^{\frac{z_{i+1}+z_{i}}{2}} E\phi\left(z\right) dz$$

$$\sim \left[E\phi_{i}z\right]^{\frac{z_{i+1}+z_{i}}{2}}_{\frac{z_{i}+z_{i-1}}{2}} \left(\because z \in \left[\frac{z_{i-1}+z_{i}}{2}, \frac{z_{i}+z_{i+1}}{2}\right] \Rightarrow \phi\left(z\right) \sim \phi_{i}\right)$$

$$= E\phi_{i}\epsilon$$

ここで、

$$A_{i,i-1} \equiv -\frac{\hbar^2}{\epsilon^2} \frac{1}{m_i^* + m_{i-1}^*}$$
(2.15)

$$A_{i,i} \equiv \frac{\hbar^2}{\epsilon^2} \left(\frac{1}{m_{i+1}^* + m_i^*} + \frac{1}{m_i^* + m_{i-1}^*} \right) + V_i$$
(2.16)

$$A_{i,i} \equiv -\frac{\hbar^2}{\epsilon^2} \frac{1}{m_{i+1}^* + m_i^*}$$
(2.17)

とおくと、

$$\begin{pmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ A_{2,1} & A_{2,2} & A_{2,3} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & A_{3,2} & A_{3,3} & A_{3,4} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & A_{n-1,n-2} & A_{n-1,n-1} & A_{n-1,n} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & A_{n,n-1} & A_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \vdots \\ \phi_{n-1} \\ \phi_n \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \vdots \\ \phi_{n-1} \\ \phi_n \end{pmatrix}$$

よって、上の式の左辺1つめの行列をA、2つめの行列を ϕ とすると、

$$A\phi = E\phi \tag{2.18}$$

の固有値 *E* とそれに対応した波動関数を表す固有ベクトル ϕ を求めればいいことがわかる。 実際に、この方法を用いて自由電子の *L* = 10 Å の無限の井戸型ポテンシャルの解析解と数値解を比較し たものが図 2.3 となる。また、エネルギーについては数値解が 0.375109eV(基底状態)、1.50037(第一励 起状態) となっており、解析解の

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$$

を用いた 0.37603eV(基底状態)、1.50412eV(第一励起状態)と比較しても 0.5% 以内の精度となっている。 ところで、ブロッホ関数に関して

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + V\left(\boldsymbol{r}\right) + \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m_0} + \frac{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}}{m_0}\right)u\left(\boldsymbol{r}\right) = Eu\left(\boldsymbol{r}\right)$$
(2.19)

が成立するので、 $H' \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{k \cdot p}{m_0}$ を摂動項として扱う k・p 摂動論を用いると、例えば、一次摂動として

$$E = E\left(k=0\right) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^4}{m_0^2} \sum_{j \neq i} \frac{\langle i | \mathbf{k} \cdot \nabla | j \rangle \langle j | \mathbf{k} \cdot \nabla | i \rangle}{E_i - E_j}$$
(2.20)

が得られる。

式 (2.19) を k·p 摂動論を用いて解くことで、[001] 方向に結晶成長した量子井戸構造において、電子波数



図 2.3 無限の井戸型ポテンシャルの解析解と数値解の比較

とエネルギーの分散関係の非放物性による有効質量のエネルギー依存性を表したものは式 (2.21) と導出 される [36]。

$$m^{*}(E) = m_{0} \frac{E - E_{\nu}}{E_{P}}$$
(2.21)

ただし、 m_0 は電子の質量、 $E - E_\nu$ は伝導帯から価電子帯の頂点 (Γ 点) までのエネルギー (バルクの伝 導帯の底 (Γ 点) では $E = E_c$ となりバンドギャップエネルギー E_g と等しくなる)、 E_P は Kane エネル ギーとする。

また、伝導帯のΓ点に関して、エネルギーとしては

$$E_{\nu} = \frac{2E_{lh} + E_{so}}{3}$$
(E_{lh} :軽い正孔に対する Γ 点、 E_{so} : スプリットオフバンドの Γ 点)

である。

実際に GaN に関して、 $E_g = 3.44$ eV、 $E_P = 13.6$ eV[37]、 $E_{lh} = 0.008$ eV として、有効質量のエネルギー 依存性を考慮した場合の分散関係と考慮しない場合の分散関係を比較した図が図 2.4 となる。

2.3 サブバンド間の光吸収に関する理論

量子井戸ナノ構造では不連続な離散エネルギーが発生することを前節で述べた。そこで、この節では基 底準位のみが電子で占有されていた場合の、光吸収によるサブバンド間における遷移理論について述べ る。

非摂動系のシュレーディンガー方程式が

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{2.22}$$



図 2.4 有効質量のエネルギー依存性を考慮した非放物線の分散関係

と表され、摂動系を含めた全体の系が時間に依存しないハミルトニアン $H_0 + H_{int}$ であるとする。 このとき、摂動項が十分に小さく、観測時間が十分長い場合に、初期状態の非摂動状態 $|\psi_i\rangle$ から単位時間 あたりに非摂動状態 $|\psi_f\rangle$ に遷移する確率 $\omega_{i\to f}$ を考える。 シュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = (H_0 + H)|\psi\rangle$$
 (2.23)

$$\psi = e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}}\psi_0 \tag{2.24}$$

とすると、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_0\rangle = H_{0tot}|\psi_0\rangle \left(\hbar \mathcal{E} \cup H_{0tot} \equiv e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}H_{int}e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}}\right)$$
(2.25)

よって

$$|\psi_0\rangle = \sum_n c_n(t) |n\rangle \tag{2.26}$$

とおくと、

$$i\hbar \frac{dc_n}{dt} = \sum_m \langle n|H_{int}|m\rangle \exp\left(\frac{i\left(E_n - E_m\right)t}{\hbar}\right)c_m \tag{2.27}$$

いま、

$$c_n (t = 0) = \begin{cases} 1 (n = initial \ state) \\ 0 (n \neq initial \ state) \end{cases}$$
(2.28)

であるから逐次近似を用いて

$$c_{final \ state}\left(t\right) = \left\langle f|H_{int}|i\right\rangle \frac{\exp\left(\frac{i(E_f - E_i)t}{\hbar}\right) - 1}{E_f - E_i}$$
(2.29)

従って

$$|c_{final \ state} (t)|^{2} = |\langle f|H_{int}|i\rangle|^{2} 2 \frac{1 - \cos(E_{f} - E_{i})t/\hbar}{(E_{f} - E_{i})^{2}}$$
(2.30)

ここで、δ関数に関する公式

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \to \infty} \frac{1 - \cos \alpha}{\pi \alpha x^2}$$
(2.31)

を用いて

$$\omega_{i \to f} = \frac{1}{t} \left| c_{final \ state} \left(t \right) \right|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle f \left| H_{int} \right| i \right\rangle \right|^2 \delta \left(E_f - E_i \right)$$
(2.32)

となる。

今回、基底状態にある電子が電磁場による電子との相互作用で励起状態に遷移する現象を考えるので、電磁場のラグランジアンから電子と光の相互作用ハミルトニアンを導出する。電子が光との相互作用を受けたときのラグランジアン L は電磁場のスカラーポテンシャルを ϕ 、素電荷を q、ベクトルポテンシャルを A とすると、

$$L = \frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{r}}^2 + q\boldsymbol{A}\cdot\dot{\boldsymbol{r}} - q\phi \qquad (2.33)$$

であるので、運動量は

$$\boldsymbol{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}} = m \dot{\boldsymbol{r}} + q \boldsymbol{A} \tag{2.34}$$

と表される。

この運動量を用いて、電磁場における電子のハミルトニアンは

$$H = \frac{(\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A})^2}{2m^*} + V(\boldsymbol{r}) \simeq H_0 + \frac{e}{m^*}\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{p}$$
(2.35)

となる。

ところで、フェルミの黄金則より

$$W_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle f \left| \frac{e}{m^*} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} \right| i \right\rangle \right|^2 \delta \left(E_f - E_i - \hbar \omega \right)$$
(2.36)

マクスウェルの方程式から

$$\nabla \times \boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} = -\frac{\partial \left(\nabla \times \boldsymbol{A}\right)}{\partial t} = -\nabla \times \left(\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}\right)$$
(2.37)

ここで、電場の波動とベクトルポテンシャルの関係性に関して、

$$\boldsymbol{E} \equiv E_0 \boldsymbol{e} \sin\left(\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t\right) \tag{2.38}$$

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \frac{E_0 \boldsymbol{e}}{\omega} \sin\left(\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t\right)$$
(2.39)

故に光と電子の相互作用による時間平均をとった遷移確率 ѿ は

$$\overline{w} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{eE_0}{2m^*\omega}\right)^2 \left|\left\langle f \left| \boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{p} \right| i\right\rangle\right|^2 \delta\left(E_f - E_i - \hbar\omega\right)$$
(2.40)

である。

ここで、光子の波数のオーダーに関して、 μm オーダーの波長の光であるから、光の波数は 10⁶ (m^{-1}) オーダーとなる。一方で、電子波の波数のオーダーに関して、原子数個分程度で数 nm のオーダーの波長 であるから、電子の波数は 10⁹ (m^{-1}) オーダーとなる。このことから、光子の波数 ≪ 電子の波数となる ので、運動量保存則において、光子の波数は無視できることがわかる。すなわち、遷移前の電子の波動関 数の結晶成長方向に垂直な平面の波数を k_{xy}^i 、遷移後の電子の波動関数の結晶成長方向に垂直な平面の波 数を k_{xy}^f とすると、 $k_{xy}^i = k_{xy}^f (\equiv k_{xy})$ が成立することがわかる。 よって、遷移前の波動関数 $|i\rangle$ 、遷移後の波動関数 $|f\rangle$ は

$$|i\rangle = \frac{1}{\sqrt{A}} u_{\boldsymbol{k}}^{c}(\boldsymbol{r}) e^{i\boldsymbol{k}_{xy}\cdot\boldsymbol{R}} \varphi_{n}(z)$$
(2.41)

$$|f\rangle = \frac{1}{\sqrt{A}} u_{\mathbf{k}}^{c} \left(\mathbf{r} \right) e^{i\mathbf{k}_{xy} \cdot \mathbf{R}} \varphi_{n'} \left(z \right)$$
(2.42)

と表される。式 (2.40) の $\langle f | \boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{p} | i \rangle$ の部分を考えると、

$$\langle f | \boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{p} | i \rangle = \frac{1}{A} \langle u_{\boldsymbol{k}}^{c} | \boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{p} | u_{\boldsymbol{k}}^{c} \rangle \langle n' | n \rangle + \frac{1}{A} \langle u_{\boldsymbol{k}}^{c} | u_{\boldsymbol{k}}^{c} \rangle \langle n' | \boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{p} | n \rangle$$
(2.43)

$$= \frac{1}{A} \langle n' | \boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{p} | n \rangle (\because \langle n' | n \rangle = 0, \langle u_{\boldsymbol{k}}^{c} | u_{\boldsymbol{k}}^{c} \rangle = 1)$$
(2.44)

$$= \frac{1}{A} \int \varphi_{n'}^{*}(z) p_{z} \varphi_{n}(z) dz \int_{A} dx dy (\because xy \, \bar{z} h) h(z) dz dz = 0 \quad (2.45)$$

$$= \int \varphi_{n'}^*(z) \, p_z \varphi_n(z) \, dz \tag{2.46}$$

となる。これは単電子あたりの遷移確率であるので、フェルミディラック統計を考えて、全体の遷移する 電子数 W は

$$\overline{W} = \sum_{k_x} \sum_{k_y} \overline{w} \left(f^{FD} \left(E_n \right) \left(1 - f^{FD} \left(E_{n'} \right) \right) - f^{FD} \left(E_{n'} \right) \left(1 - f^{FD} \left(E_n \right) \right) \right)$$
(2.47)

$$=\sum_{k_x}\sum_{k_y}\overline{w}\left(f^{FD}\left(E_n\right) - f^{FD}\left(E_{n'}\right)\right)$$
(2.48)

単位時間、単位体積当たりの吸収エネルギーを Pとすると、式 (2.48)を用いて、

$$\overline{P} = \frac{\hbar\omega\overline{W}}{AL_z} \tag{2.49}$$

$$= \frac{\hbar\omega}{AL_z} \sum_{n,n'} \sum_{k_x,k_y} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle n' \left| \frac{e}{m^*} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} \right| n \right\rangle \right|^2 \times \left(f\left(E_n\right) - f\left(E_{n'}\right) \right) \delta\left(E_{n'} - E_n - \hbar\omega\right)$$
(2.50)

ここで、xy 平面 (量子井戸の結晶成長方向に垂直な平面) が連続準位であるので $\sum_{k_x,k_y} \rightarrow \int d^2 \mathbf{k} \rho_{2D} = \frac{2L^2}{(2\pi)^2} \int d^2 \mathbf{k} = \frac{2A}{(2\pi)^2} \int d^2 \mathbf{k}$ と表される。

また、入射光のポインティングベクトルを \overline{S} は、光の物質中の速度を v_{Φ} 、物質の屈折率をn、入射する 電磁場のエネルギー密度を $\overline{\omega_{em}}$ 、物質の誘電率を ϵ_r とすると、

$$\overline{S} = \overline{\omega_{em}} v_{\Phi} = \overline{\omega_{em}} \frac{c}{n}$$
(2.52)

ここで、

$$\overline{\omega_{em}} = \overline{\omega_e} + \overline{\omega_m} = 2\overline{\omega_e} = 2 \times \frac{1}{2}\epsilon_r \epsilon_0 \overline{|\boldsymbol{E}|^2} = \frac{1}{2}\epsilon_r \epsilon_0 E_0^2, \epsilon_r = n^2$$
(2.53)

を用いて

$$\overline{S} = \frac{1}{2}cn\epsilon_0 E_0^2 \tag{2.54}$$

となる。

ところで、吸収係数 α の定義は

$$\alpha = \frac{
 単位時間、単位体積当たりの吸収エネルギー}
 単位時間、単位面積当たりの入射エネルギー
 = $\frac{\overline{P}}{\overline{S}}$$$

となるから、

$$\alpha L_{z} = \frac{\pi e^{2}}{\epsilon_{0} c n \omega m^{*2}} \sum_{n,n'} \frac{2}{\left(2\pi\right)^{2}} \times \int d^{2} \boldsymbol{k} \left| \langle n' | p_{z} | n \rangle \right|^{2} \left(f\left(E_{n}\right) - f\left(E_{n'}\right) \right) \delta\left(E_{n'} - E_{n} - \hbar\omega\right)$$
(2.55)

となる。この式とランベルト・ベールの法則

$$T = \frac{\overline{I_p}}{\overline{I_{p0}}} = \exp\left(-\alpha z\right)$$

を用いて、透過率を求めることが出来る。

また、通常 δ 関数は

$$\delta \left(E_{n'} - E_n - \hbar \omega \right) \simeq \frac{\frac{1}{\pi}}{\left(E_{n'} - E_n - \hbar \omega \right)^2 + \Gamma^2}$$

のようなローレンツ関数を用いて近似する。

ただし、 $\Gamma(eV)$ は電子の有限の寿命 τ を考慮した物であり、通常ハイゼンベルグの不確定性原理 $\Gamma \tau \simeq \hbar$ から求めることが出来る。

例えば、基底状態が電子で占有され、基底状態の電子数 ≫ 第一励起状態の電子数となると仮定すると、 二次元キャリア濃度

$$n_i \equiv \int_{E_i}^{\infty} f^{FD}(E) \rho^{2D}(E) dE = \frac{k_B T m}{\pi \hbar^2} \ln\left(1 + \exp\left(\frac{E_F - E_i}{k_B T}\right)\right)$$
(2.56)

ъ

と振動子強度

$$f_{nn'} \equiv \frac{2}{m^* \hbar \omega} \left| \langle n' \left| p_z \right| n \rangle \right|^2 \tag{2.57}$$

を用いて、光入射による基底状態から第一励起状態のサブバンド間遷移に関する吸収係数 $\alpha_{1\rightarrow 2}$ は式 (2.55) を用いて、

$$\alpha_{1\to2} = \frac{(n_1 - n_2) e^2 \hbar}{2\epsilon_0 cnm^* L_z} f_{12} \frac{\Gamma}{\left(E_2 - E_1 - \hbar\omega\right)^2 + \Gamma^2}$$
(2.58)

となる。

2.4 サブバンド間の電子散乱に関する理論

この節では前節で述べた電子の有限の寿命 r に関する理論について決定するために LO フォノン散乱 確率、およびフェルミの黄金則を用いて電子の波動関数に対する依存性について説明する。

まず、サブバンド間の電子散乱に関してフォノン散乱が支配的なことを説明する。光が入射されて基底状態から励起状態へ遷移した電子は、図 2.5 のように、基底状態と励起状態で分散関係は同じ放物線を描くので、波数方向にフォノンを放出することで電子が散乱される。そこで、フォノンの基本的なモデルについて考える。フォノンの最も基本的なモデルとしては、図 2.6 のように質量の違う二つの粒子を互いに交互にばねでつながれたモデルが挙げられる。このとき、各粒子の運動方程式は n 番目にある粒子 2 の位



図 2.5 光が入射したときの LO フォノンによる電子散乱機構の概略図



図 2.6 格子振動 (フォノン) のモデル

置を $s_{n,2}$ tと表すとすると、

$$M_1 \frac{d^2 s_{n,1}}{dt^2} = -f\left(s_{n,1} - s_{n-1,2}\right) + f\left(s_{n,2} - s_{n,1}\right) = f\left(s_{n,2} - 2s_{n,1} + s_{n-1,2}\right)$$
(2.59)

$$M_2 \frac{d^2 s_{n,2}}{dt^2} = -f\left(s_{n,2} - s_{n,1}\right) + f\left(s_{n+1,1} - s_{n,2}\right) = f\left(s_{n+1,1} - 2s_{n,2} + s_{n,1}\right)$$
(2.60)

となるので、振動していない場合の粒子の間隔を a とすると、

$$s_{n,1} \equiv \frac{1}{\sqrt{M_1}} u_1(q) e^{i(qan-\omega t)}$$
 (2.61)

$$s_{n,2} \equiv \frac{1}{\sqrt{M_2}} u_2(q) e^{i(qan-\omega t)}$$
 (2.62)

と表されるから、

$$\begin{pmatrix}
\omega^{2} - \frac{2f}{M_{1}}, \frac{f}{\sqrt{M_{1}M_{2}}} \left(1 + e^{-iqa}\right) \\
\frac{f}{\sqrt{M_{1}M_{2}}} \left(1 + e^{iqa}\right), \omega^{2} - \frac{2f}{M_{1}}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
u_{1}(q) \\
u_{2}(q)
\end{pmatrix} = 0$$
(2.63)

となる。この方程式が $u_1(q) = u_2(q) = 0$ 意外の解を持つためには

$$\frac{\omega^2 - \frac{2f}{M_1}}{\frac{f}{\sqrt{M_1 M_2}}} \left(1 + e^{-iqa} \right) \\ \frac{f}{\sqrt{M_1 M_2}} \left(1 + e^{iqa} \right) , \ \omega^2 - \frac{2f}{M_1} \end{aligned} = 0$$
 (2.64)

を満たさねばならない。式 (2.64) を解くと、

$$\omega^{2} = f\left(\left(\frac{1}{M_{1}} + \frac{1}{M_{2}}\right) \pm \sqrt{\left(\frac{1}{M_{1}} + \frac{1}{M_{2}}\right)^{2} - \frac{4}{M_{1}M_{2}}\sin^{2}\left(\frac{qa}{2}\right)}\right)$$
(2.65)



図 2.7 格子振動 (フォノン) のモデル

となる。この波数と角振動数の分散関係をグラフに書くと、図 2.7 のようになる。図 2.7 の黒の線は光学 モードを示し、粒子1と粒子2は互いに図 2.8 のように振幅に対して逆方向に振動して極性が発生するた め、光と強く相互作用する。光学モードにおいて、波数が0 すなわち運動量が0 でも粒子1と粒子2 が 逆方向を向くためエネルギーを持つ。また、図 2.7 の赤の線は音響モードを示し、粒子1と粒子2 は互い に図 2.8 のように振幅に対して同じ方向に振動する。そして、光学モードは原子数個分という比較的小さ な波長(すなわち、大きな波数)で起こりうるのに対して、音響モードは比較的大きな波長(すなわち、小 さな波数)で起こりうる。一般には、光学モードには縦波の光学モードである LO フォノンと横波の光学



図 2.8 光学モードの概略図 (左) と音響モードの概略図 (右)

モードである TO フォノンに分類され、また、音響モードには縦波の音響モードである LA フォノンと横 波の音響モードである TA フォノンに分類される。また、単位胞の原子数を r 個とすると、空間は三次元 なので縦波 1 つ、横波 2 つで、分散関係は 3r 個あり、また、r 個の原子のうち、1 個は ω (q = 0) = 0 を 満たすような音響フォノンであり、r - 1 個は ω (q = 0) $\neq 0$ を満たすような光学フォノンである。 次に実際に GaN、AlN の格子振動に関して考えていく。GaN、AlN の位置を

$$\boldsymbol{s}_{GaN}\left(j\right) \equiv \sum_{q} \boldsymbol{u}_{GaN}\left(q\right) e^{i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_{GaN}-\omega t)}$$
(2.66)

$$\boldsymbol{s}_{AlN}\left(j\right) \equiv \sum_{q}^{r} \boldsymbol{u}_{AlN}\left(q\right) e^{i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_{AlN}-\omega t)}$$
(2.67)

とおくと、

$$\boldsymbol{u}_{GaN}\left(q\right) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \boldsymbol{s}_{GaN}\left(j\right) e^{-i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_{GaN}-\omega t)}$$
(2.68)

$$\boldsymbol{u}_{AlN}\left(q\right) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \boldsymbol{s}_{AlN}\left(j\right) e^{-i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_{AlN}-\omega t)}$$
(2.69)

となる。ただし、N は 1LO モードにおける 1 周期の原子の数である。また、 N_q を 1LO モードに含まれる平均のフォノン数とすると、

$$\frac{1}{2}m\omega^{2} |\boldsymbol{u}_{GaN}(q) - \boldsymbol{u}_{AlN}(q)|^{2} N = N_{q}E_{LO}$$
(2.70)

と表される。

次に、電子格子相互作用、すなわち、電子とフォノンによって引き起こされた分極の相互作用について考 えていく。微小体積 V 中に N 個の電気双極子モーメントを **p**、単位体積当たりの電気双極子モーメント を **P** とすると、

$$\boldsymbol{P} = \frac{N}{V}\boldsymbol{p} \tag{2.71}$$

$$\boldsymbol{P} = e^* \left(\boldsymbol{u}_{GaN} \left(q \right) - \boldsymbol{u}_{AlN} \left(q \right) \right) \frac{N}{V} e^{i \left(\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{r} - \omega_q t \right)}$$
(2.72)

となる。ただし、e* は素電荷でなく、フォノンが輸送される際の見かけの電荷量 (輸送電荷) である。従って、分極電荷は

$$\rho_P = -\nabla \cdot \boldsymbol{P} \tag{2.73}$$

$$= Re\left[-e^{*}\nabla \cdot \left(\boldsymbol{u}_{GaN}\left(q\right) - \boldsymbol{u}_{AlN}\left(q\right)\right)\frac{N}{V}e^{i\left(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r} - \omega_{q}t\right)}\right]$$
(2.74)

$$= Re\left[-e^{*}i\boldsymbol{q}\cdot\left(\boldsymbol{u}_{GaN}\left(q\right)-\boldsymbol{u}_{AlN}\left(q\right)\right)\frac{N}{V}e^{i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}-\omega_{q}t)}\right]$$
(2.75)

縦波のフォノンである場合、 $\boldsymbol{q} \parallel (\boldsymbol{u}_{GaN}(q) - \boldsymbol{u}_{AlN}(q))$ であるから、

$$\boldsymbol{q} \cdot (\boldsymbol{u}_{GaN} (q) - \boldsymbol{u}_{AlN} (q)) = q |\boldsymbol{u}_{GaN} (q) - \boldsymbol{u}_{AlN} (q)|$$

すなわち

$$\rho_{P}\left(L-mode\right) = Re\left[-e^{*}iq\left|\boldsymbol{u}_{GaN}\left(q\right)-\boldsymbol{u}_{AlN}\left(q\right)\right|\frac{N}{V}e^{i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}-\omega_{q}t)}\right]$$

となり、分極電荷が生じるため、電子格子相互作用が起きる。一方で、横波のフォノンである場合、 $q \perp (u_{GaN}(q) - u_{AlN}(q))$ であるから、

$$\boldsymbol{q} \cdot (\boldsymbol{u}_{GaN}(q) - \boldsymbol{u}_{AlN}(q)) = 0$$
、すなわち $\rho_P(T - mode) = 0$

となり、分極電荷が生じないため、電子格子相互作用は起きない。 この分極電荷をポアソン方程式 $\nabla^2 \Phi_q = -\frac{\rho_P (L - mode)}{\epsilon}$ に代入し、単位電子あたりの電子格子相互作 用の静電ポテンシャル Φ_q は

$$\Phi_{q} = Re\left[-\frac{e^{*}}{\epsilon_{0}\epsilon_{\infty}}iq\left|\boldsymbol{u}_{GaN}\left(q\right) - \boldsymbol{u}_{AlN}\left(q\right)\right|\frac{N}{V}\int e^{i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}-\omega_{q}t)}d^{2}\boldsymbol{r}\right]$$
(2.76)

$$= Re\left[-\frac{e^{*}}{\epsilon_{0}\epsilon_{\infty}}iq\left|\boldsymbol{u}_{GaN}\left(q\right) - \boldsymbol{u}_{AlN}\left(q\right)\right|\frac{N}{V} \times \frac{1}{\left(iq\right)^{2}}e^{i\left(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}-\omega_{q}t\right)}\right]$$
(2.77)

$$= -\frac{e^*}{\epsilon_0 \epsilon_\infty} \left| \boldsymbol{u}_{GaN} \left(q \right) - \boldsymbol{u}_{AlN} \left(q \right) \right| \frac{N}{V} \times \frac{1}{q} \sin \left(\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{r} - \omega_q t \right)$$
(2.78)

となる。従って、全体的な電子格子相互作用のポテンシャル Ve--phonon は

$$V_{e^--phonon} = \sum_q -e\Phi_q \tag{2.79}$$

$$=\sum_{q} e \frac{e^{*}}{\epsilon_{0} \epsilon_{\infty}} \left| \boldsymbol{u}_{GaN} \left(q \right) - \boldsymbol{u}_{AlN} \left(q \right) \right| \frac{N}{V} \times \frac{1}{q} \sin \left(\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{r} - \omega_{q} t \right)$$
(2.80)

と表される。ここで、古典的な調和振動子モデルを考え、 $s \equiv u_{GaN}(q) - u_{AlN}(q)$ とすると、

$$M\left(\frac{d^2\boldsymbol{s}}{dt^2}\right) \simeq -M\omega_{TO}^2\boldsymbol{s} + e^*\boldsymbol{E}$$
(2.81)

ここで、 $\boldsymbol{s} = \boldsymbol{s}_0 \exp\left(i\left(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t\right)\right)$ 、 $\boldsymbol{E}_0 = \boldsymbol{E}_0 \exp\left(i\left(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t\right)\right)$ として

$$s_0 = \frac{e^* E_0}{M \left(\omega_{TO}^2 - \omega^2\right)}$$
(2.82)

が得られる。従って、単位体積当たりの電気双極子モーメント Pは

$$\boldsymbol{P} = \frac{N}{V} \boldsymbol{p}_{i} = \frac{N}{V} e^{*} \boldsymbol{s}_{0} = \frac{e^{*2} N \boldsymbol{E}_{0}}{M V} \frac{1}{(\omega_{TO}^{2} - \omega^{2})}$$
(2.83)

と表されるので、誘電率 $\epsilon(\omega)$ は真空の誘電率 ϵ_0 を用いて、

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 \epsilon_\infty + \frac{e^{*2}N}{MV(\omega_{TO}^2 - \omega^2)}$$
(2.84)

となり、静的誘電率を $\epsilon(0) = \epsilon_0 \epsilon_{st}$ とすると、LST の関係式 $\frac{\omega_{LO}^2}{\omega_{TO}^2} = \frac{\epsilon(0)}{\epsilon_0 \epsilon_{\infty}}$ を用いて、

$$\frac{e^{*2}N}{MV} = \omega_{TO}^2 \left(\epsilon\left(0\right) - \epsilon_0 \epsilon_\infty\right) = \epsilon_0 \epsilon_\infty \left(\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2\right)$$
(2.85)

$$=\omega_{LO}^{2}\epsilon_{0}\epsilon_{\infty}\left(1-\frac{\epsilon_{0}\epsilon_{\infty}}{\epsilon(0)}\right)=\omega_{LO}^{2}\epsilon_{0}\epsilon_{\infty}\left(1-\frac{\epsilon_{\infty}}{\epsilon_{st}}\right)$$
(2.86)

と表される。よって、式 (2.70)、(2.79)、(2.86) より

$$V_{e^--phonon} = \sum_{q} -e\Phi_q$$

$$= \sum_{q} \frac{ee^*}{\epsilon_0 \epsilon_\infty} |\boldsymbol{u}_{GaN}(q) - \boldsymbol{u}_{AlN}(q)| \frac{N}{V} \times \frac{1}{q} \sin(\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{r} - \omega_q t) (\because \vec{\pi} (2.79))$$

$$= \sum_{q} \frac{e}{\epsilon_0 \epsilon_\infty} \sqrt{\frac{MV}{N}} \omega_{LO}^2 \epsilon_0 \epsilon_\infty \left(1 - \frac{\epsilon_\infty}{\epsilon_{st}}\right) |\boldsymbol{u}_{GaN}(q) - \boldsymbol{u}_{AlN}(q)| \frac{N}{V}$$

$$\times \frac{1}{q} \sin(\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{r} - \omega_q t) (\because \vec{\pi} (2.86))$$

$$= \sum_{q} \frac{e}{\epsilon_0 \epsilon_\infty} \times \sqrt{\frac{MV}{N}} \omega_{LO}^2 \epsilon_0 \epsilon_\infty \left(1 - \frac{\epsilon_\infty}{\epsilon_{st}}\right) \times \sqrt{\frac{2N_q E_{LO}}{M \omega_{LO}^2 N}} \times \frac{N}{V}$$

$$\times \frac{1}{q} \sin(\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{r} - \omega_q t) (\because \vec{\pi} (2.70))$$

$$= \sum_{q} \frac{1}{q} \sqrt{\frac{2e^2}{V \epsilon_0}} E_{LO} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_{st}}\right) \sqrt{N_q} \sin(\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{r} - \omega_q t)$$

この式に含まれる $\sqrt{N_q}$ はフォノンの消滅演算子 a_q に関する式

$$a_q|N_q\rangle = \sqrt{N_q}|N_q - 1\rangle$$

に由来するものであり、相互作用は電子散乱からのフォノンの生成もありうるので、最終的な電子格子相 互作用のハミルトニアン $H_{e^--phonon}$ は $V_{e^--phonon}$ の時間平均も考えて、

$$H_{e^--phonon} = \sum_{q} \frac{1}{2q} \sqrt{\frac{2e^2}{V\epsilon_0}} E_{LO}\left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_{st}}\right) \left(a_q e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} - a_q^{\dagger} e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\right)$$
(2.87)

$$=\sum_{q}\frac{1}{q}\sqrt{\frac{e^2}{2V\epsilon_0}}E_{LO}\left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}}-\frac{1}{\epsilon_{st}}\right)\left(a_q-a_{-q}^{\dagger}\right)e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}$$
(2.88)

となる。今回は LO フォノンによる電子散乱のみを考えていくとする。電子のサブバンドの波動関数 ψ は

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i \boldsymbol{k}_{xy} \cdot \boldsymbol{R}} \varphi_n(z) u^c(\boldsymbol{r}) \equiv \frac{1}{\sqrt{A}} \alpha u^c(\boldsymbol{r})$$

と表される。ここで、 $\langle \alpha_f | \alpha_i \rangle = 0, \left\langle u_f^c | u_i^c \right\rangle = 0$ であるから、

$$\langle \psi_f \left| H_{e^- - phonon} \right| \psi_i \rangle$$

$$= \frac{1}{A} \left\langle u_f^c \left| H_{e^- - phonon} \right| u_i^c \right\rangle \left\langle \alpha_f \left| \alpha_i \right\rangle + \frac{1}{A} \left\langle u_f^c \left| u_i^c \right\rangle \left\langle \alpha_f \right| H_{e^- - phonon} \right| \alpha_i \right\rangle$$

$$= \frac{1}{A} \left\langle \alpha_f \left| H_{e^- - phonon} \right| \alpha_i \right\rangle$$

となり、フォノンを放出することによる散乱現象のみを考えた場合のハミルトニアン V は

$$V = \sum_{\boldsymbol{q}} \frac{1}{q} \sqrt{\frac{e^2}{2V\epsilon_0}} E_{LO}\left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{st}}\right) a_{\boldsymbol{q}}^{\dagger} e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}$$

とすると、フェルミの黄金則を用いて、フォノンを放出することによる電子格子相互作用における電子の 遷移確率は

$$W_{e^--phonon} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{n,n'} \sum_{\boldsymbol{q}} \left| \langle \psi_f \left| V \right| \psi_i \rangle \right|^2 \delta\left(\left(E_{n'} + \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}}^{\prime 2}}{2m} \right) + \hbar\omega_{LO} - \left(E_n + \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}}^2}{2m} \right) \right)$$

となる。式変形を行い、 $W_{e^--phonon}$ は

$$W_{e^--phonon} = \frac{e^2 \omega_{LO} m}{4\pi^2 \hbar^2 \epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{st}} \right) (N_q + 1) \\ \times \int_0^{2\pi} d\theta \int \frac{1}{\left| |\boldsymbol{q}_{xy}|_+ - |\boldsymbol{q}_{xy}|_- \right|} dq_{xy} q_{xy} I_{2D} \left(\boldsymbol{q}_{xy} \right) \\ \times \left(\delta \left(|\boldsymbol{q}_{xy}| - |\boldsymbol{q}_{xy}|_+ \right) + \delta \left(|\boldsymbol{q}_{xy}| - |\boldsymbol{q}_{xy}|_- \right) \right)$$

また、式変形の詳細は Appendix A を参照にしていただきたい。

ここで、いま図 2.9 のような $E_n - E_{n'} > \hbar\omega_{LO}$ かつ励起状態のキャリア数が少ない、すなわち $|\mathbf{k}_{xy}| \simeq 0$ とみなせる場合について考える。 $|\mathbf{k}_{xy}| \simeq 0$ のとき、

$$|\boldsymbol{q}_{xy}| = \sqrt{-\frac{2m\omega'_e}{\hbar}} = \sqrt{\frac{2m\left((E_n - E_{n'}) - \hbar\omega_{LO}\right)}{\hbar^2}}$$



図 2.9 フォノン放出時の分散関係の概略図

であり、
$$\left| \left| \boldsymbol{q}_{xy} \right|_{+} - \left| \boldsymbol{q}_{xy} \right|_{-} \right| = 2q_{xy}$$
 となるので、式 (A.1) より、
 $W_{e^--phonon} = \frac{e^2 \omega_{LO} m}{4\pi^2 \hbar^2 \epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{st}} \right) (N_q + 1) \times 2\pi \times \frac{1}{2} \int dq_{xy} I_{2D} \left(\boldsymbol{q}_{xy} \right)$
 $= \frac{m e^2 \omega_{LO}}{4\hbar^2 \epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{st}} \right) (N_q + 1) \frac{1}{q_{xy}}$
 $\times \int dz dz' \varphi_{n'}^* (z) \varphi_n (z) \varphi_{n'}^* (z') \varphi_n (z') e^{-q_{xy}|z-z'|}$

となる。従って、フォノンを放出することで電子格子相互作用を受けて、励起状態が基底状態へと緩和する時間 τ_{emit} は $W_{e^--phonon}$ の逆数をとればよいので、

$$\tau_{emit} = \frac{1}{W_{e^--phonon}} = \left(\frac{me^2\omega_{LO}}{4\hbar^2\epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_{st}}\right) (N_q + 1) \frac{1}{q_{xy}} I_{zz'}\right)^{-1}$$
(2.89)

となる。ただし、

$$I_{zz'} \equiv \int dz dz' \varphi_{n'}^{*}(z) \varphi_{n}(z) \varphi_{n'}^{*}(z') \varphi_{n}(z') e^{-q_{xy}|z-z'|}$$
(2.90)

$$q_{xy} \equiv \sqrt{\frac{2m\left((E_n - E_{n'}) - \hbar\omega_{LO}\right)}{\hbar^2}} \tag{2.91}$$

$$N_q \equiv \frac{1}{\exp\left(-\frac{\hbar\omega_{LO}}{k_B T}\right) - 1} \tag{2.92}$$

である。また、図 2.10 フォノンを吸収する電子格子相互作用に関して考えていく。フォノン吸収時のハ ミルトニアンに関して、フォノン放出時のハミルトニアンにおいて、 $a_q^{\dagger} \rightarrow a_q$ と置き換えたもの、すなわ ち $N_q + 1 \rightarrow N_q$ と置き換えたものに等しくなるので、フォノンを吸収することで電子格子相互作用を受



図 2.10 フォノン吸収時の分散関係の概略図

けて、励起状態が基底状態へと緩和する時間 Tabs は

$$\tau_{abs} = \left(\frac{me^2\omega_{LO}}{4\hbar^2\epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{st}}\right) N_q \frac{1}{q_{xy}} I_{zz'}\right)^{-1}$$
(2.93)

となる。ただし、エネルギーが ħωLO 分だけあがることに注意して、

$$I_{zz'} \equiv \int dz dz' \varphi_{n'}^{*}(z) \varphi_{n}(z) \varphi_{n'}^{*}(z') \varphi_{n}(z') e^{-q_{xy}|z-z'|}$$
(2.94)

$$q_{xy} \equiv \sqrt{\frac{2m\left((E_n - E_{n'}) + \hbar\omega_{LO}\right)}{\hbar^2}} \tag{2.95}$$

$$N_q \equiv \frac{1}{\exp\left(-\frac{\hbar\omega_{LO}}{k_B T}\right) - 1} \tag{2.96}$$

である。以上から、電子格子相互作用による励起状態から基底状態へ遷移する電子の緩和時間 τ は

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{emit}} + \frac{1}{\tau_{abs}}$$

となる。

2.5 窒化物の分極

この節では、窒化物材料特有の強い圧電効果 (ピエゾ効果)の理論について述べる。窒化物が他の半導体材料に比べて強い圧電効果を示す理由としては以下のような点が考えられている。

- 窒化物の V 族元素である窒素の電気陰性度が大きく III 族原子と V 族原子の間の結合に強いイオン性がある
- ・ 窒化物半導体がウルツ鉱型の結晶構造を取り、中でも [0001] は分極が最も表れやすい結晶方位である

窒化物半導体結晶の最も安定した結晶構造であるウルツ鉱型結晶構造の模式図である。窒化物は基本的に 図 2.11 のように六方晶系の構造になっており、*C*_{6V} 群の構造になっている。通常、図 2.11 の [0001] 軸 方向 (c 軸方向)に結晶成長する。一般に、ウルツ鉱型結晶構造の四面体の内部構造が完全な正四面体と



図 2.11 窒化物ウルツ鉱型結晶構造

なっていないため、全く外力がなくとも、分極が生じる。これを自発分極と呼び、自発分極 P_{spAlGaN} は

$$P_{spAlGaN} = -0.090x - 0.034(1-x) + 0.021x(1-x)$$

と表される [38]。また、GaN、AlN は a 軸方向に 0.3 図 2.12 はピエゾ効果、分極方向の概略図である。 (1)~(3) は GaN を下地として GaN、AlN を [0001] 方向に結晶成長したものである。このとき、(1)~ (3) はどれも GaN と AlN の間で + σ の電荷密度が発生する。(4)~(6) は AlN を下地として GaN、AlN を [0001] 方向に結晶成長したものである。この場合は GaN と AlN の間に $-\sigma$ の電荷密度が生じるので このような方向に分極が生じる。なお、全ての場合において格子緩和した場合は歪みが全くなくなるので ピエゾ分極は生じず、自発分極のみとなる。最終的な分極の効果としては、自発分極とピエゾ分極の和で

$$P = P_{sp} + P_{pz}$$

と表される。ここで、応力テンソルを σ_{jk} 、圧電率のテンソルを d_{ijk} とすると、

$$P_{pz,i} = d_{ijk}\sigma_{jk}$$

が成立する。(この節ではアインシュタインの縮約で表記している。) また、フックの法則により応力テンソル σ_i は C_{ij} を弾性定数、歪みを ϵ_j とすると、

$$\sigma_i = C_{ij}\epsilon_j$$

である。さらに、一般に、ピエゾ電界定数を e_{kij} として、 $P_{pz,i} = e_{kij}\epsilon_j$ という関係式があり、 $e \ge d \ge C$ の関係性として

$$e_{kl} = d_{kj}C_{jl}$$

が知られている。したがって、

$$P_{pz} = e_{33}\epsilon_z + e_{31}\left(\epsilon_x + \epsilon_y\right)$$



図 2.12 分極方向の概略図

となる。ただし、

 $e_{31} = (C_{11} + C_{12}) d_{31} + C_{13} d_{33}$ $e_{33} = 2C_{13} d_{31} + C_{33} d_{33}$

である。

物性定数	GaN	AlN	InN
$P_{sp}\left[C/m^2\right]$	-0.090	-0.034	-0.042
$d_{31}\left[pm/V\right]$	-2.1	-1.6	-3.5
$d_{33}\left[pm/V\right]$	5.4	3.1	7.6
$e_{31}\left[C/m^2\right]$	-0.536	-0.527	-0.484
$e_{33}\left[C/m^2\right]$	1.561	0.895	1.058
$C_{11}\left[GPa ight]$	396	390	223
$C_{12}\left[GPa ight]$	137	145	115
$C_{13}\left[GPa\right]$	108	106	92
$C_{11}\left[GPa\right]$	373	398	224

表 2.1 窒化物に関するピエゾ効果の物性定数 [39]

ここで、一般的に歪みは

$$\epsilon_x = \epsilon_y = \frac{a - a_0}{a_0}$$
$$\epsilon_z = \frac{c - c_0}{c}$$

と表される。ここで、 a_0, c_0 は歪みのない格子定数であり、a, c は下地によって歪んだ格子定数である [38]。例えば、GaN を下地として AlN の歪みを考えるとき $a = a_{GaN}, a_0 = a_{AlN}$ である。 ここで、x 軸と y 軸の歪みが等方的であると考えると、体積と垂直方向と水平方向の歪みの関係性から、

$$\epsilon_z = \frac{c - c^0}{c_0} = -\frac{C_{13}}{C_{33}} \left(\epsilon_x + \epsilon_y\right) = -2\frac{C_{13}}{C_{33}}\epsilon_x$$

となるから、最終的にピエゾ分極は

$$P_{pz} = 2\frac{a - a_0}{a_0} \left(e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right)$$

と表される。また、本研究で用いた、分極の物性定数は表 2.1 のようになっている [39]。

2.6 ポアソン方程式によるバンド構造のシミュレーション

この節では半導体のドーピングや電子数の関係性について述べ、本研究で行ったポアソン方程式による バンド構造のシミュレーションの原理について説明していく。

あるエネルギー状態における電子数は

と表せる。シュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi = E\psi$$

に関して、周期的境界条件

$$\psi(x + L_x, y, z) = \psi(x, y + L_y, z) = \psi(x, y, z + L_z) = \psi(x, y, z)$$

によって、

$$\psi\left(x,y,z\right) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

となる。ただし、境界条件から

$$\begin{cases} k_x L_x = 2\pi n_x \\ k_y L_y = 2\pi n_y \\ k_z L_z = 2\pi n_z \end{cases} (n_x, n_y, n_z \in \mathbf{Z})$$

従って、k空間における半径 kの球面を考え、半径 $k \ge k + dk$ により構成される ΔV を求めると、

$$\Delta V = 4\pi k^2 dk$$

となる。この微小空間にはシュレーディンガー方程式より $(2\pi/L)^3$ の単位胞があるため、電子のスピン も考え、電子の状態密度 N(E) は

$$N(E) dE = \frac{2 \times 4\pi k^2 dk}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \left(\frac{L^3}{\pi^2}\right) k^2 dk$$

ここでバルクの場合、

$$dk = \frac{\sqrt{2m^*}}{2\hbar} E^{-\frac{1}{2}} dE$$

であるので、単位体積あたりの状態密度は

$$N(E) dE = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} dE$$

となる。したがって、n型半導体バルクの場合、電子濃度nは

$$n = \int_{E_c}^{\infty} N(E) f(E) dE = \int_{E_c}^{\infty} N(E) \frac{1}{1 + \exp\left(\left(E - E_F\right)/k_B T\right)} dE$$
$$\simeq \int_{E_c}^{\infty} N(E) \exp\left(-\frac{E - E_F}{k_B T}\right) = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_B T}\right)$$

ただし、

$$N_c = 2\left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}$$

アクセプターの場合は $f(E) \rightarrow 1 - f(E)$ と置き換えて同様に計算して、p型半導体バルクの場合、ホール濃度 p は

$$p = N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{k_b T}\right)$$

となる。ただし、

$$N_V = 2 \left(\frac{m_h^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}$$

である。いま、ドーピングとして電子を一様に濃度 N_D でドープした場合を考える。0K でドナーから放 出される電子は全てドナー自身に束縛されているが、このうち有限温度で伝導帯へ励起される電子濃度を n、ドナーに束縛された電子濃度を n_D とすると、電気的中性条件より

$$n + n_D = N_D$$

である。ヘルムホルツ自由エネルギー F = U - TS に関して、 N_D 個の電子を n_D の状態に割り振る場合の数 W を考えて、 $S = k_B \log W$ より

$$F = E_D n_D - k_B T \log \left(2^{n_D} \frac{N_D!}{n_D! (N_D - n_D)!} \right)$$

と表される。ただし、 2^{n_D} の項はスピン自由度に由来するものである。スターリングの公式 log $N! \sim N \log N - N$ を用いて

$$\mu = E_F = \frac{\partial F}{\partial n_D} = E_D - k_B T \log\left(\frac{2\left(N_D - n_D\right)}{n_D}\right)$$

で与えられるから、

$$n_D = N_D \left(1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_D - E_F}{k_B T}\right) \right)^{-1}$$

が得られ、有限温度で伝導帯へ励起される電子濃度 n は

$$n = N_D \left(1 - \left(1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_D - E_F}{k_B T}\right) \right)^{-1} \right) = N_D \left(1 + 2 \exp\left(\frac{E_F - E_D}{k_B T}\right) \right)$$

また、アクセプターの場合

$$n_A = N_A \left(1 + 2 \exp\left(\frac{E_A - E_F}{k_B T}\right) \right)^{-1}$$
となる。T = 0Kの場合は $E_F = E_D$ となることがわかる。電荷中性条件からn型半導体バルクの場合は

$$n = N_D + p \simeq N_D$$

p型半導体バルクの場合は

$$p = N_A + n \simeq N_A$$

である。この関係からフェルミエネルギーの境界条件が求まる。電束密度 **D** に関して、マクスウェルの 方程式から

$$\nabla \cdot \boldsymbol{D} = \rho$$

であるので、

$$\nabla \cdot (\epsilon \boldsymbol{E} + \boldsymbol{P}_{pz} + \boldsymbol{P}_{sp}) = -\rho\rho = q \left(N_D - N_A - n + p\right)$$
(2.97)

ただし、静電ポテンシャルを ψ 、 ϕ_n 、 ϕ_p を擬フェルミエネルギー (熱平衡時は $\phi_n = \phi_p \equiv E_F$)として、

$$\begin{cases} \mathbf{E} = \nabla \psi \\ n = n_i \times \exp\left(\frac{q(\psi - \phi_n)}{k_B T}\right) \\ p = n_i \times \exp\left(\frac{q(\phi_p - \psi)}{k_B T}\right) \end{cases}$$

であり、 n_i は真性キャリア濃度、

$$n_i = \sqrt{N_c N_V}$$

と表される。

ここで、異種の二つ以上の材料を用いるときについて考えると、

$$\epsilon (z + \delta z) \frac{\psi (z + 2\delta z) - \psi (z)}{2\delta z} - \epsilon (z - \delta z) \frac{\psi (z) - \psi (z - 2\delta z)}{2\delta z}$$
$$+ P_{sp} (z + \delta z) + P_{pz} (z + \delta z) - P_{sp} (z - \delta z) - P_{pz} (z - \delta z)$$
$$= (-qn_i (z) (N_D (z) - N_A (z) - n (z) + p (z))) \times 2\delta z$$

これを GaN の PN 接合 (ただし、P 型半導体、N 型半導体のドーピング濃度は両方とも $2 \times 10^{18}/cm^3$) について実際に数値計算してみたところ、図 2.13 のようになった。この解析解を考えると、拡散電位 V_d の式

$$V_d = \frac{k_B T}{q} \ln\left(\frac{n_n}{n_p}\right) = \frac{k_B T}{q} \ln\left(\frac{N_A N_D}{n_i^2}\right)$$

に $N_A = N_D = 2 \times 10^{18}/cm^3$ 、 $n_i = 1.3248 \times 10^{-10}/cm^3$ を代入して

 $V_d = 3.3536 eV$

となり、精度は 0.1 また、空乏層幅 d の式

$$d = \sqrt{\frac{2\epsilon N_a}{qN_d \left(N_d + N_a\right)}V_d} + \sqrt{\frac{2\epsilon N_d}{qN_a \left(N_d + N_a\right)}V_d}$$

に代入してd = 58.7nmとなるが、数値解も55nmであり、近い値をとっている。



図 2.13 GaN における PN 接合のバンド図

2.7 2 重障壁ダイオードのトンネル電流に関する理論

この節では図 2.14 のような量子構造に流れる電子、電流について考える。 多電子系の電流密度は 2.99 のように表記される。

$$\boldsymbol{J} = e \sum_{\boldsymbol{k}} f_{FD}(E_{k}) \boldsymbol{S}(\boldsymbol{r}) = \frac{e\hbar}{m} \sum_{k} f_{FD}(E_{k}) Im(\varphi_{k}^{*}(\boldsymbol{r}) \nabla \varphi_{k}(\boldsymbol{r}))$$
(2.98)

xの正の方向への波動関数 $\varphi_k(\mathbf{r})$ は

$$\varphi_{k}\left(\boldsymbol{r}\right) = \frac{1}{\sqrt{L^{3}}} t\left(k_{x}\right) e^{ik_{x}x} e^{i\boldsymbol{k}_{t}\cdot\boldsymbol{r}_{t}}$$

となるので、トンネル確率を $T(E_k, V) = |t(k_x)|^2$ とおき、

$$J_{12} = \frac{e}{L^3} \sum_{k_t} \sum_{k_x > 0} \frac{\hbar k_x}{m} T(E_{k_x}, V) f_{FD}(E_k)$$
(2.99)

となる。

ここで、多数の電子が存在する2つの電極間を流れる電流を考える場合、厳密には右側電極でのパウリの 排他律を考慮する必要があることに注意しなければならない。すなわち、右側のフェルミエネルギー以下 のエネルギー領域にはすでに電子が存在しているため、たとえトンネル確率が有限であるとしてもパウリ の排他律が働きトンネリングが禁止される。これを考慮しての電流密度を波数積分で表すと

$$J_{12} = \frac{e}{L^3} \sum_{k} \sum_{k_x > 0} \frac{\hbar k_x}{m} T(E_{k_x}, V) f_{FD}^L(E_k) \left(1 - f_{FD}^R(E_k + eV) \right)$$
$$= \frac{2e}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k}_t \int_0^{\infty} dk_x T(E_{k_x}, V) \frac{\hbar k_x}{m} f_{FD}^L(E_k) \left(1 - f_{FD}^R(E_k + eV) \right)$$



図 2.14 量子構造に流れる電子

$$J_{21} = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k}_t \int_{-\infty}^{0} dk_x T(E_{k_x}, V) \frac{\hbar k_x}{m} f_{FD}^R(E_k + eV) \left(1 - f_{FD}^L(E_k)\right) \\ = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k}_t \int_{0}^{\infty} dk_x T(E_{k_x}, V) \frac{\hbar k_x}{m} f_{FD}^R(E_k + eV) \left(1 - f_{FD}^L(E_k)\right)$$

ここで、 $f_{FD}(E_{-k}) = f_{FD}(E_k)$ の関係を用いた。正味の電流密度は

$$J = J_{12} + J_{21} = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k}_t \int_0^{\infty} dk_x T(E_k, V) \frac{\hbar k_x}{m} \left(f_{FD}^L(E_k) - f_{FD}(E_k + eV) \right)$$

となる。有効質量近似を用いて

$$E_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*}, \ E_t = \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m^*}, \ E = E_x + E_t$$

と表すと、

$$J = \frac{em^*}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty dE_x \int_0^\infty dE_t T\left(E_x, V\right) \left(f_{FD}^L\left(E\right) - f_{FD}^R\left(E + eV\right)\right)$$

が得られる。さらに横方向のエネルギー Et の積分を実行すると、

$$J = \frac{em^*k_BT}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty dE_x T\left(E,V\right) \ln\left(\frac{1 + \exp\left(\frac{E_F - E_x}{k_BT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{E_F - E_x - eV}{k_BT}\right)}\right)$$
(2.100)

が得られる。また、トンネル確率 T(E, V) に関してだが、本研究では転送行列法を用いて考えた。そこで、転送行列法について簡単に説明する。

一定のポンテシャルがある場合、波数を含めた波動関数は

$$\psi\left(x\right) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

と表される。境界条件として、

$$\psi_i\left(\frac{x_i+x_{i+1}}{2}\right) = \psi_{i+1}\left(\frac{x_i+x_{i+1}}{2}\right)$$

$$\left(\frac{1}{m_i^*}\frac{d\psi_i\left(x\right)}{dx}\right)_{x=\frac{x_i+x_{i+1}}{2}} = \left(\frac{1}{m_i^*}\frac{d\psi_i\left(x\right)}{dx}\right)_{z=\frac{x_i+x_{i+1}}{2}}$$

となるので、

$$\left(\begin{array}{c}A_{i+1}\\B_{i+1}\end{array}\right) = T_i \left(\begin{array}{c}A_i\\B_i\end{array}\right)$$

ここで、 T_i は伝達行列と呼ばれ、

$$T_{i} = \frac{1}{2} \left(\begin{array}{c} \left(1 + \frac{m_{i+1}^{*}}{m_{i}^{*}} \frac{k_{i}}{k_{i+1}}\right) e^{j(k_{i} - k_{i+1})\frac{x_{i} + x_{i+1}}{2}} \\ \left(1 - \frac{m_{i+1}^{*}}{m_{i}^{*}} \frac{k_{i}}{k_{i+1}}\right) e^{j(k_{i} + k_{i+1})\frac{x_{i} + x_{i+1}}{2}} \\ \left(1 - \frac{m_{i+1}^{*}}{m_{i}^{*}} \frac{k_{i}}{k_{i+1}}\right) e^{j(k_{i} + k_{i+1})\frac{x_{i} + x_{i+1}}{2}} \\ \left(1 + \frac{m_{i+1}^{*}}{m_{i}^{*}} \frac{k_{i}}{k_{i+1}}\right) e^{-j(k_{i} - k_{i+1})\frac{x_{i} + x_{i+1}}{2}} \end{array} \right)$$

と表される。ところで、入射波と反射波の境界条件から

$$\left(\begin{array}{c}A_N\\0\end{array}\right) = \left(\begin{array}{c}T_{11}&T_{12}\\T_{21}&T_{22}\end{array}\right) \left(\begin{array}{c}1\\B_1\end{array}\right)$$

となり、ここからトンネル確率T(E,V)は

$$T(E,V) = \left| \frac{J_N}{J_1} \right| = \left| \frac{v_N}{v_1} \right| |A_N|^2$$
$$= \left| \frac{\frac{\hbar k_N}{m_N^*}}{\frac{\hbar k_1}{m_1^*}} \right| |A_N|^2 = \left| \frac{m_1^* k_N}{m_N^* k_1} \right| |A_N|^2$$

となる。



図 2.15 ポテンシャル概略図

そこで、実際に図 2.15 のような階段型ポテンシャルでシミュレーションと反射率 R、透過率 T の厳密解 である

$$R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}$$
$$T = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4\sqrt{E(E - V_0)}}{\left(\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}\right)^2} (E > V_0)$$

を比較したところ、図 2.16 のようになった。



図 2.16 トンネル確率のシミュレーションと厳密解の比較

2.8 共鳴トンネルダイオードを用いた高周波の発振原理

この節では共鳴トンネルダイオードによる高周波発振現象を回路方程式を用いて定量的に考えてみる。 共鳴トンネルダイオードによる発振回路の等価回路を図 2.17 に示した。 共鳴トンネルダイオードの静特性として、静特性で得られた電流電圧特性を三次関数でフィッティングし

て、電源電圧 V₀ で与えられる点を原点としたもので考えている。



図 2.17 共鳴トンネルダイオードを用いた高周波回路 (左図) 左図の回路を簡略化いた回路 (右図)

回路方程式として、

$$\left\{ \begin{array}{l} -i_c = i_d + i \\ i = f\left(V\right) = -\alpha V + \beta V^2 + \gamma V^3 \\ V = L \frac{di_d}{dt} \\ i_c = C \frac{dV}{dt} \end{array} \right.$$

が成立するため、

$$\frac{d^2V}{d\left(\frac{t}{\sqrt{LC}}\right)^2} + \sqrt{\frac{L}{C}} \left(-\alpha + 2\beta V + 3\gamma V^2\right) \frac{dV}{d\left(\frac{t}{\sqrt{LC}}\right)} + V = 0$$

が得られる (自励発振のファン・デル・ポール方程式)。 ここで、

$$x = \sqrt{\frac{3\gamma}{\alpha}}V, \ \epsilon = \sqrt{\frac{L}{C}}\alpha, \ k = \frac{2\beta}{\sqrt{3\gamma\alpha}}, \ \tau = \frac{t}{\sqrt{LC}}$$

とおくと、

$$\frac{d^2x}{d\tau^2} - \epsilon \left(1 - kx - x^2\right)\frac{dx}{d\tau} + x = 0$$

である。

これを $\alpha = 0.05$ 、 $\beta = 0$ 、 $\gamma = 0.0007$ 、 $L = 3 \times 10^{-14} [H]$ 、 $C = 1 \times 10^{-12} [F]$ として数値計算したもの が図 2.18~図 2.22 となる。また、 ΔV_{peak} 、 ΔI_{peak} の変化を考えるために α を変化させると、図 2.23 の ようになった。このことから、THz の出力を大きくするためには、高周波の電流幅を大きくしなければ ならないが、高周波の電力を大きくするためには ΔV_{peak} 、 ΔI_{peak} を大きくしなければならない。すなわ ち、GaN のようなサブバンド間のエネルギーが大きいもの方が出力が大きく出来ることがわかる。



図 2.18 高周波回路の数値計算結果 (インダクタンスの電圧 L_V)



図 2.19 高周波回路の数値計算結果 (RTD に流れる電流 IRTD)



図 2.20 高周波回路の数値計算結果 (インダクタンスに流れる電流 IL)



図 2.21 高周波回路の数値計算結果 (RTD に流れる電流 I_C)



図 2.22 負性抵抗とインダクタンスに流れる電流 IL の関係



図 2.23 PV 比と発振電流



図 2.24 PV 比と発振電流 2

第3章

実験原理および実験手法

本章では本研究で用いられた実験装置の原理や、それを用いた実験手法について具体的な説明を行う.

3.1 有機金属結晶成長法 (MOVPE 法)

エピタキシャル成長においては、何らかの方法で堆積しなければならない。本研究で用いた有機金属気 相成長法(Metalorganic Vapor Phase Epitaxy: MOVPE)では、図 3.1 のように有機金属の蒸気を原料 として気相から固相へと相転移させることで結晶成長を行っている。



図 3.1 本研究で用いた MOVPE 装置

MOVPE 法以外の代表的な結晶成長方法である分子線エピタキシー成長法(Molecular Beam Epitaxy: MBE)と比較すると、大気圧付近で成長するため真空引きの必要が無く、かつ大面積に均一に結晶成長を行うことができるため、大量生産に向いている方式となっている。今回、III 族として原料ガスの有機 金属は、Ga 原料としてトリメチルガリウム(Trimethylgallium: TMGa)、Al 原料としてトリメチルア ルミニウム(Trimethylalminium: TMAl)を使用した。また、V 族として N 原料はアンモニア NH3 ガ ス、n 型ドーパントとしてシランガス SiH₄ を使用した。

トリメチルガリウム、トリメチルアルミニウムの途中反応を省略して結果のみを記すと、

$(CH_3)_3Ga+NH_3\rightarrow GaN+3CH_4$

$(CH_3)_3AI+NH_3 \rightarrow AIN+3CH_4$

という反応が起こっている。結晶成長が行われる基板はサセプターと呼ばれるカーボンの円形ディスク の上に設置され、円形ディスクが回転することで結晶成長を均一化することが出来、これは RF で最大 1300 ℃付近まで加熱される。本研究で用いた MOVPE にはその場観察のための反射率測定装置が設置さ れており、成長中の基板の表面に関する情報が得られるようになっている。基板の反射率からは結晶成長 中の表面の平坦性や成長速度などが分かり、結晶成長の制御性を向上させるための情報が得られる。

3.2 X 線回折法 (XRD)

X線の波長のオーダーは、1Åであり、原子間隔よりもやや小さいため、X線が結晶に入射すると、結晶を構成する原子の電子が入射したX線の周波数で振動して結晶の原子からは入射X線と同じ波長のX線が発生する。本研究のX線源としては数+kVの高電圧で加速された電子線をCuに照射することで放出される特性X線を用いた。

ところで、図 3.2 のような平行な原子層が積み重なって結晶を構成しているモデルを考える。試料の結晶 面に角度 θ 方向から波長 λ の X 線が入射したとき、入射した X 線が面間距離 d の隣り合った面で回折さ れて強めあう条件は

$$2d\sin\theta = n\lambda\left(n: \underline{\mathbf{x}}\underline{\mathbf{x}}\right)$$

となる (ブラッグの法則)。



図 3.2 X 線回折モデル

ブラッグの法則より、入射角を変えながら X 線を試料へ入射し、回折した X 線の強度を測定してこの原 理を用いることで、試料の結晶構造を推定することができる。この方法として、本研究ではロッキング カーブ、ω-20 測定、逆格子マップを用いた。ロッキングカーブは、図 3.3(1) のように、20 をある回折 ピーク位置に固定し、ω 方向に θ 付近でスキャンすることで結晶の配向性を評価する測定法である。エピ タキシャル成長した結晶は、基板に対しある方位関係を持っているが、実際には図 3.4 のように原子配列 の乱れなどにより局所的に方位がまちまちとなる。すなわち、配向性が低くなり、この方位の揺らぎはス キャンでのピークの広がりとして検出される。しかし、ここで注意しなければならないのは結晶の面間距 離は必ずしも同じとは限らない。多重量子井戸構造のような基板と異種の格子定数の違う材料をエピタキ シャル成長して歪の大きい場合がそれにあたる。この変化を観察するためには、図 3.3(2) に示すような ω-2θ 測定を行う必要がある。この測定は実空間において、入射 X 線に対して基板を回転するとき、検出 器をその 2 倍の角度動かして行うものである。この回折ピーク位置から格子面間隔 d を求め、格子定数 を求めることができる。



図 3.3 (1) ロッキングカーブ測定 (2)2θ – ω 測定



図 3.4 ロッキングカーブ (a) 配向性に乱れがない場合 (b) 配向性に乱れがある場合

サンプルの1点について 2θ をある値に固定してロッキングカーブ測定を行った後、検出器を少しだけ回転させて再度ロッキングカーブ測定を行うことを繰り返すことで、ロッキングカーブ測定とω-2θ 測定を組み合わせ、成長した結晶が基板の結晶と異なった方位に成長した場合や成長した結晶中に部分的に格子定数などの異なる結晶が混在した場合など1次元的に走査しただけでは、どのような現象が起こっているのか判断が難しいような複雑な場合でも、結晶の状態を明確に把握することができる。このような測定を逆格子空間マッピング (Reciprocal Space Mapping:RSM) という。

ここで、以下のように表される逆格子空間における直行座標系 Q_x 、 Q_y を用いると格子の歪みに関して

実空間との相関を理解しやすい [40]。

$$Q_x = \frac{\sqrt{\frac{4}{3} (h^2 + hk + k^2)}}{a}$$
$$= \frac{\left[\cos \omega_{10\bar{1}5} - \cos \left(2\theta_{10\bar{1}5} - \omega_{10\bar{1}5}\right)\right] - \left[\cos \omega_{0002} - \cos \left(2\theta_{0002} - \omega_{0002}\right)\right]}{\lambda}$$
$$Q_y = \frac{l}{c} = \frac{\sin \omega_{0002} + \sin \left(2\theta_{0002} - \omega_{0002}\right)}{\lambda}$$

本研究では AlGaN の AlN 成分を求めるために [105] 方向で逆格子マッピングを測定したので [105] 方向 を例にとった。

3.3 原子間力顕微鏡 (AFM)



図 3.5 AFM 構成図

原子間力顕微鏡 (Atomic Force Microscope:AFM) は nm オーダーという高分解能で表面形状を観測 できる装置である。具体的な原理としては図 3.5 のように AFM 探針は、カンチレバーの先端に取り付け られている。AFM 探針と試料表面を微小な力で接触させ、AFM 探針が試料表面に近づくと探針の振動 振幅は減少し、逆に遠ざかると増加する。カンチレバーのたわみ量が一定になるように、探針・試料間距 離をフィードバック制御して、この変化を打ち消して、ある一定の振動振幅を保つように走査していく。 AFM 探針の振動振幅の検出方法として、本研究ではレーザーを用いた。図 3.5 のように、AFM 探針の 先端にレーザを照射すると、探針の反りによって反射光の角度がわずかに変化し、フォトダイオードで検 出されるレーザの位置も振動するので、AFM 探針の振動振幅を検出することができる。

3.4 フーリエ変換赤外分光法 (FTIR)

本研究では、量子井戸の評価をするためにフーリエ変換赤外分光法(FTIR: Fourier Transform Infra-Red Spectroscopy)を用いて量子準位間のサブバンド間遷移を観測した。そこで、この節ではFTIRの 原理について述べる。



図 3.6 FTIR の測定系

図 3.6 のようにマイケルソン干渉計を使用し、回折格子の代わりに干渉波を計算で分光し、非分散で全波 長を同時に検出することが出来る。FTIR の主な測定系としては、光源としてのハロゲンランプ、ハーフ ミラーと1枚の固定ミラー、1枚の可動ミラーから構成されたマイケルソン干渉計、検出器となってい る。ハロゲンランプからの光は、ハーフミラーに斜めに入射され、透過光と反射光の二つの光束に分割さ れる。分割された二つの光束は、固定ミラーと可動ミラーで反射されハーフミラーに戻り、再び合成され 干渉する。可動ミラーの位置により光路差が生じ、異なる光の干渉波が得られ、可動ミラーの位置におけ る干渉波の信号強度から計算で各波数成分の光の強度に分離できる。

具体的な計算としては、固定ミラー (M1) からハーフミラーに戻ってくる光をu(t)、可動ミラー (M2) からハーフミラーに戻ってくる光を M1 から戻ってくる光よりも時間が τ だけ遅れるとして $u(t - \tau)$ と表される。

2つの光の干渉光に対して、何もサンプルが無く、直接干渉光の入射した光検出器の出力電流 *i_p* は、応 答時間 *T* の間の平均光パワーに比例する。

$$i_p \propto \left\langle \left| u\left(t\right) + u\left(t-\tau\right) \right|^2 \right\rangle$$
$$= \left\langle \left| u\left(t\right) \right|^2 + \left| u\left(t-\tau\right) \right|^2 + u\left(t\right) u^*\left(t-\tau\right) + u^*\left(t\right) u\left(t-\tau\right) \right\rangle$$
$$\simeq 2 \left\langle \left| u\left(t\right) \right|^2 \right\rangle + 2Re\left[\left\langle u\left(t\right) u\left(t-\tau\right) \right\rangle \right]$$

2項目の干渉項について、

$$Re\left[u(t) u(t-\tau)\right] = \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} u(t) u^*(t-\tau) dt$$

と表され、u(t)の平均自己相関関数となっている。検出器の観測時間 T は光周波数の周期より十分に長いから、 $T \to \infty$ の条件は成立している。 ここで、u(t)のパワースペクトル $P(\omega)$ を

$$P\left(\omega\right) == \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \left| \int_{-T/2}^{T/2} u\left(t\right) e^{-i\omega t} dt \right|$$

ウィナー・キンチンの定理より、 $Re[u(t)u(t-\tau)]$ をフーリエ変換すると、

$$Re\left[u\left(t\right)u\left(t- au
ight)
ight]
ightarrow P\left(\omega
ight)$$

が成り立つ。すなわち、干渉出力をフーリエ変換すれば、光源のパワースペクトル密度が求められること がわかる。実際には、図 3.6 のように、得られた検出器の電流を AD 変換し、そのデータをコンピュータ 上で高速フーリエ変換している。

3.5 ホール測定

本研究では、n型半導体について Hall 測定を行ったので、n型半導体を例に Hall 効果について述べる。



図 3.7 ホール測定

図 3.7(a) のように、z 方向に磁束密度 B_z をかけ x 方向に電流 I_x が流れている場合を考える。定常状態ではキャリアに働くローレンツ力と電界から受ける力が等しくなり、

$$-qE_y - (-qv_x B_z) = 0$$

となる。また電流 I_x は、素子の幅をb、厚さをt、ホール濃度をpとすると、

$$I_x = -qnv_x bt$$

である。従って、y方向に現れる電圧(ホール電圧)をV_Hとすれば

$$V_H = E_y b = R_H \frac{I_x B_z}{t}$$

と表される。ただし、 R_H はホール定数であり、

$$R_H = -\frac{1}{qn}$$

となる。また、n型半導体の電気伝導率 σ_n は

$$\sigma_n = q\mu_n n$$

であるから

$$\mu_n = |R_H| \,\sigma_n$$

と表される。このようにして、ホール電圧や試料の厚さから試料中のキャリア濃度や移動度を計算するこ とができる。

次に、本研究で用いた van der Pauw 法について説明する。van der Pauw 法で測定するためには、次の 条件を満たさなければならない。

- 測定する膜の厚さが均一
- 試料内に貫通した穴がない
- 電極が試料の周辺にある
- 電極のサイズが試料と比較して非常に小さい

van der Pauw 法は数 µm 程度の薄膜状の半導体の Hall 効果を測定するのに適した方法であり、理論上 では任意の形状でホール測定出来るはずだが、実際の測定では、測定電圧間が不均衡になると誤差を生じ やすいため、ある程度均整のとれた形状のものを使用した方がよい。本研究では、図 3.7(b) のような電 極パターンを使った。また、電極のサイズは 500µm×500µm である。

試料表面の電極 A,B,C,D に関して、磁界を印加せず、電極 AB 間に電流 I_{AB} を流し、電極 CD 間の電圧 V_{CD} を測定し、

$$R_{AB,CD} = \frac{V_{CD}}{I_{AB}} (\equiv R_1)$$

と定義する。同様、電極 BC 間に電流 IBC を流し、電極 DA 間の電圧 VDA を測定し、

$$R_{BC,DA} = \frac{V_{DA}}{I_{BC}} (\equiv R_2)$$

と定義する。このとき等角写像法を用いた二次元伝導のモデルから、試料の抵抗率をρとすると、

$$\exp\left(-\frac{\pi t}{\rho}R_1\right) + \exp\left(-\frac{\pi t}{\rho}R_2\right) = 1$$

そして、試料に垂直に磁界 B_z を加えたとき、抵抗 $R_{AC,BD}$ の変化を $\Delta R_{AC,BD}$ として、ホール定数 R_H は

$$R_H = \frac{d}{B_z} \Delta R_{AC,BD}$$

である。また、移動度μ、キャリア濃度 n は

$$\mu = \frac{|R_H|}{\rho} = \frac{t}{B\rho} \left| \Delta R_{AC,BD} \right|, \ n = \frac{1}{R_H q} = \frac{B}{qt} \frac{1}{\left| \Delta R_{AC,BD} \right|}$$

と表される。

3.6 伝送線モデル法 (TLM 法)

本研究ではコンタクト抵抗を評価するために伝送線モデル法 (Transmission Line Model:TLM 法) を 用いた。TLM 法とは、図 3.8 に示すように、電極とその直下の半導体層を伝送線回路と等価と考えて解 析する方法である。伝送線の理論を用いて、図 3.8 のコンタクトの x 方向の電圧 V(x) および電流 I(x)は

$$V(x) = V(0) \cosh\left(\frac{x}{L_t}\right) - I(0) Z \sinh\left(\frac{x}{L_t}\right)$$
$$I(x) = I(0) \cosh\left(\frac{x}{L_t}\right) - V(0) \sinh\left(\frac{x}{L_t}\right)$$

と表される。



図 3.8 TLM 法の等価回路

ただし、Z は伝送線の特性インピーダンス、 L_t は伝搬長である。TLM 法において、DC で測定するため 等価回路においてコンデンサの影響は考えなくてよい。



図 3.9 (a) 接触抵抗の測定サンプル図 (b) 伝搬長と電圧の関係

ここで、図 3.9(b) のように、 $d > L_t$ のとき、伝搬長 L_t の距離だけ金属直下に入り込み線形的に電位差が生じ、半導体の接触抵抗に影響を与える。

金属の接触抵抗 $R_c(\Omega)$ 以外に、コンタクトを定量的に評価するパラメーターとして、固有接触抵抗 $\rho_c(\Omega cm^2)$ が存在する。等価回路のモデルから電極直下以外の半導体層のシート抵抗を R_{SH} 、電極直下

の半導体のシート抵抗を R_{SK} とすると、全体の抵抗 R は

$$R = \frac{2R_{SK}L_T}{W} + \frac{R_{SH}L}{W} = \frac{R_{SH}L}{W} + 2R_c$$
(3.1)

と表される。

測定するサンプルとしては、図 3.9(a) のように、半導体に電極を L だけ離して蒸着し、抵抗 R を測定す る。これを L を変化させながら測定し、横軸に L、縦軸に R をとり、線形フィットすると、式 (3.1) から シート抵抗 R_{SH} を求めることができる。また、半導体の場合、距離に応じて線形的に電圧が変化すると 考えてよいから、 $R_{SK}=R_{SH}$ とすることが出来、L 切片が 2 L_t となるので、伝搬長 L_t 、コンタクト抵抗 R_c も求めることが出来る。また、このとき

$$\rho_c = R_c \times L_t \times W \tag{3.2}$$

と表すことが出来る。

第4章

量子井戸ナノ構造の結晶成長およびメサ 構造試料作製プロセスの確立

共鳴トンネルダイオードを製作するためには、まず図 4.1 のようなメサ構造を作製するために、以下の 結晶成長の条件、およびプロセスの条件を考察しなければならない。

- 1. GaN/AlGaN 量子井戸構造の結晶成長
- 2. GaN キャップ層の結晶成長
- 3. 窒化物のドライエッチング
- 4. 蒸着する金属の種類



図 4.1 共鳴トンネルダイオード作製のためのメサ構造

そこで、この章ではプロセスの条件を考察していくとともに、共鳴トンネル構造の最適化について述べる。

4.1 GaN/AlGaN 量子井戸構造の結晶成長

この節では GaN/AlGaN を用いた量子井戸構造を製作するために、まずは従来の先行研究である GaN/AlN 多重量子井戸構造の結晶成長を基に GaN/AlGaN の多重量子井戸構造の結晶成長の改善お よび条件出しをした。GaN/AlN の多重量子井戸構造の結晶成長は図 4.2 のような方法で TMG および $\begin{array}{c|c} SiH_4 \\ \hline TMGa \\ ((CH_3)_3Ga) \\ \hline TMAI \\ ((CH_3)_3AI) \\ \hline NH_3 \\ \hline \end{array}$

SiH₄ をパルスで、また、TMA および NH₃ を連続的に 800 ℃で供給することで結晶成長していた。ま

図 4.2 先行研究における GaN/AIN 多重量子井戸構造作製のための結晶成長シーケンス

ず、本研究では $Al_xGa_{1-x}N$ の障壁層を製作するために、TMA の圧力が変化したときに $Al_xGa_{1-x}N$ の AlN 成分 x を図 4.3(a) のような逆格子マップから求めた [41]。図 4.3(b) のように線形的に変化すること



図 4.3 (a)GaN 上に結晶成長した AlGaN の逆格子マップ (b)Al_xGa_{1-x}N 中の AlN 成分 x の変化

がわかった。この条件から Al_{0.2}Ga_{0.8}N を障壁層とした GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N の多重量子井戸構造を作製 し、表 4.3 に示すように条件を振った。

番号	MQW の 結晶成長温度	GaN (パルス or 連続)	AlN (パルス or 連続)
1	1000 °C	パルス 10s(供給停止時間 7s)*2	連続 20s
2	800 °C	パルス 10s(供給停止時間 7s)*2	連続 20s
3	800 °C	パルス 10s(供給停止時間 7s)*2	パルス 10s(供給停止時間 7s)*2
4	800 °C	パルス 4s(供給停止時間 2s)*5	パルス 4s(供給停止時間 2s)*5

表 4.1 多重量子井戸の結晶成長条件

その結果、図 4.4 に示されるような XRD の結果を観測できた。特に本研究ではパルスインジェクションの AlGaN 結晶成長や温度について考察した。この結果から、1 と 2 を比較して 800 ℃で MQW を結 晶成長をした方が 1000 ℃で結晶成長した方がよい。その理由として、量子井戸を結晶成長している最



図 4.4 GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N 多重量子井戸の結晶成長の XRD 結果

中、温度が高いと熱拡散が大きいため、障壁層と井戸層の界面が拡散していくため、結晶性が悪くなるこ とが考えられる。次に、2 と 3 を比較して GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N の多重量子井戸構造を結晶成長する際には Al_{0.2}Ga_{0.8}N をパルスインジェクションで結晶成長した方がよいと考えられる。これは GaN の効果はも ちろんあるが、AlN の効果があるかどうかを確かめるため、GaN/AlN 多重量子井戸の AlN をパルスイ ンジェクションで結晶成長したものと、連続的に結晶成長したものを比較して XRD で観測したところ、 図 4.5 のようになった。この結果から、AlN ではパルスインジェクションの効果が薄いと考えられる。そ



図 4.5 GaN/AlN 多重量子井戸においてパルスインジェクションを用いた結晶成長法と用いない結晶 成長法との XRD 比較

もそも、パルスインジェクションを用いる効果として二つ意味があり、一つ目としては結晶成長速度を落 としつつも、先にガスを大量に供給することによって III/V 比を最適にして反応をよくすること、二つ目 としてパルスにすることで原子は基板の表面にある原子と相互作用しながら、基板上で移動すること (マ イグレーション)を抑えることが出来るといったメリットがある。上手くアルミニウムと窒素の反応の良 さによって最適な III/V 比が決まってくるが、図 4.5 の実験結果から、アルミニウムに比べ窒素を大量に 供給しなければならないことがわかる。また、3 と 4 を比較すると合計時間が同じ程度でも、パルスイン ジェクションを数回行うより、少ない回数で長い時間の方がよいことがわかる。

以上から、AlN 成分の少ない GaN/AlGaN を結晶成長する場合は図 4.6 のような結晶成長をすれば良い ことがわかる。



図 4.6 GaN/AlGaN 多重量子井戸構造作製のための結晶成長シーケンス

4.2 GaN キャップ層の結晶成長

この章ではキャップ層の結晶成長に関して、述べていく。まず、キャップ層を結晶成長するにあたって 重要なのはキャップ層を結晶成長すると井戸層、障壁層に熱拡散等で大きな変化を与えてしまわないかと いことである。それを検証するため、GaN/AlN 多重量子井戸を結晶成長した後、800 ℃、950 ℃、1100 ℃と温度を変えつつアニールして ISBT を測定、比較したものが図 4.7 である。この図 4.7 の結果から、



図 4.7 GaN/AlN 多重量子井戸をアニールしたサンプルの ISBT 特性

MQW が影響を受けないキャップ層の結晶成長温度が 900 ℃であることがわかる。また、この現象は

1. 熱拡散による井戸層と障壁層の界面によるもの

2. カーボンがアニールによって活性化し、ホールが増え、電子濃度が減少したことによるもの

のどちらかが原因であると考えた。そこで、2 において、カーボンがホールの役割をしていることを示 すために、800 ℃、900 ℃、1130 ℃で結晶成長し、同程度のシリコンをドーピング (~3×10¹⁸/cm³) で n-GaN を製作し、Ti/Au を蒸着し、IV 測定した結果が図 4.8 のようになった。このオーミック特性結果



図 4.8 (a)n-GaN テンプレートの Ti/Au オーミック特性に関する結晶成長温度比較 (b) 温度変化さ せたときの SIMS 測定、ホール測定結果

と、SIMS 測定結果を考えてみると、カーボンはホールの役割を果たしていると考えられている。ただし、 単純な濃度差となっていないのは、図 4.9 のように、Si のドナー準位と伝導帯の底の差と比較して、C の アクセプター準位と価電子帯の底の差が大きいためであると考えられる。次に、カーボンがアクセプター





図 4.9 Siのドナー準位、Cのアクセプター準位の概略図

として働くことが示されたので、アニールによってカーボンが活性化しているか確認するために 900 ℃で 結晶成長した n-GaN を 1100 ℃で 10 分アニール後、IV 測定したものを図 4.10 に示す。この結果から、 IV が 800 ℃の IV 測定結果のように、オーミックがとれなくなることはなかったので、高温アニールで のカーボンの p 型活性化は少ないと考えられる。つまり、図 4.7 のピーク位置が長波側へ移ることも考慮 して、MQW を結晶成長して観測した ISBT が 1100 ℃のアニールによって消滅する原因は熱拡散による 井戸層と障壁層の界面によるものだと考えられる。

4.3 窒化物のドライエッチング

窒化物のドライエッチングを行うため、CCP で Cl₂ をメインのエッチングガスとし、Ar、BCl₃のガ スを補充することでエッチングの条件出しを行った。まず、Cl₂ ガスで RF パワーを変更して GaN のド



図 4.10 1100 ℃でアニール後の IV 測定

ライエッチングを行ったところ、エッチングレートは図 4.11 のようになった。また、補充するガスの種



図 4.11 GaN のドライエッチングの RF パワー依存性

類を調べるために、ガスの種類を変更して表面の状態を SEM で確認したところ、図 4.12 のようになっ た。ここで、Cl₂ ガスをメインとして Ar ガスおよび BCl₃ ガスを補充した理由に関して、Cl₂ ガスはハ ロゲンガスなのでイオン衝撃を受けて表面のエッチングは促進されるようになる (イオン支援エッチング 反応)。Ar ガスは希ガスなので安定であるが、外から電子をぶつけて取り除くことでアルゴンプラズマイ オンが出来る。この反応が連鎖して放電し、プラズマが立ちやすくなる。そして、BCl₃ ガスはもし表面 および内部に酸化物が含まれていた場合、ホウ素がその酸化物を還元し、エッチング反応を促進する。図 4.12 の結果を考察すると、Cl₂ ガスに Ar ガスを加えるとエッチングされやすく Ar ガスの量を増やすと、 徐々に穴が発生してくる。また、BCl₃ ガスの量を増やしていくと、酸化物が含まれているため、エッチ ングのばらつきが発生し、ピラーが多く出来る。ここで、図 4.12 の表面の状態から、Ar ガスを 10sccm 入れるか、Cl₂ 以外のガスを入れない場合が最も良いと考えられ、BCl₃ ガスを入れるのなら、10sccm 入



図 4.12 補充するガスを変更した場合の表面状態の SEM

れるのが良いとわかる。そこで、今度は AlN テンプレートをドライエッチングしたところ、エッチング レートは表 4.2 のようになった。Cl₂ ガスを入れるとほとんど削れず、Ar10sccm、もしくは BCl₃ ガス 10sccm 入れれば AlN をドライエッチング出来るようになる。また、この結果から AlN の方が GaN よ り固い材料であることがわかる。

エッチングガス	エッチングレート
$Cl_2 100sccm$	$0 \mathrm{nm/s}$
$Ar10sccm+Cl_2100sccm$	$0.49 \mathrm{nm/s}$
$BCl_210sccm+Cl_2100sccm$	$0.67 \mathrm{nm/s}$

表 4.2 AlN のドライエッチング

以上から、ドライエッチングには Cl₂ ガス 100sccm、Ar ガス 10sccm で RF パワー 1000W(圧力 10Pa)



図 4.13 AlN ドライエッチング断面の SEM 写真

で削ればよいことがわかる。

また、Ar10sccm、Cl₂100sccm でドライエッチングした n-GaN に電極 Ti(20nm)/Au(300nm) をつけて 接触抵抗 R_c 、シート抵抗 R_{SH} 、伝搬長さ L_T を測定したところ、図 4.14 のようになり、

 $R_c = 16\Omega, \ R_{SH} = 18.55\Omega, \ L_T = 432mm$



図 4.14 ドライエッチングした n-GaN 上の接触抵抗の測定

となった。

4.4 蒸着する金属の種類



図 4.15 蒸着材料を変えたときの IV 特性

共鳴トンネルダイオードの負性抵抗特性をはっきりと観測するためには、蒸着する金属として接触抵抗の少ない材料を選択するべきである。そこで、本研究ではTi/Au、Ti/Al、Cr/Au、Cr/Alの材料を蒸着し、IV 特性、TLM 法を用いて接触抵抗等を測定し、比較検討した。IV 特性の測定結果は図 4.15、接触抵抗は表のようになった。ただし、Ti は 20nm、Cr は 35nm、Au,Al は 300nm 蒸着した。

この結果から、Cr/Alはオーミックがとれないので、CrよりTiの方がオーミック特性の良い材料である ことがわかる。これはTiNの合金がCrNの合金より接触特性の良いことが考察される。また、Ti/Au の接触抵抗が低いため、材料としてはTi/Auを使えばよいことがわかる。

以上の結果を踏まえて、共鳴トンネルダイオードの作製プロセスとしては次のようにすればよい。

蒸着する材料	接触抵抗 R_c	シート抵抗 R_{SH}	固有接触抵抗 $\rho_c(\Omega \text{cm}^2)$
Ti/Au	20.35Ω	76.50Ω	1912
Ti/Al	72.55Ω	387.5Ω	9686
Cr/Au	26.48Ω	58.50Ω	1462

表 4.3 多重量子井戸の結晶成長条件



第5章

RTD の特性評価と課題抽出

この節では、前節で述べたような作製プロセスを用いて、実際に共鳴トンネルダイオードを作製したの で、その実験結果について評価した。その測定結果を基に本研究における共鳴トンネルダイオードの問題 点、および課題抽出を行う。

5.1 共鳴トンネルダイオードの作製プロセス評価

まず、実際に共鳴トンネルダイオード構造を結晶成長した XRD の結果は図 5.1 のようになった。ただし、(S) はシミュレーション、(D) は XRD の観測データを示している。シミュレーションでフィッティ



図 5.1 共鳴トンネルダイオード構造の XRD 結果

ングすることにより、GaN 井戸層の厚さ、および AlGaN 障壁層の厚さは表 5.1 のようになった。

また、XRD の結果から Al_{0.65}Ga_{0.35}N の単一量子井戸層にも関わらず、サテライトピークが一つ、+ 方向と-方向に観測出来たので結晶の質はいいことがわかる。

そこで、これをドライエッチングしたものの SEM 写真は図 5.2 のようになった。CAP 層は 200nm、ア ンド―プの量子井戸層は数十 nm、n-GaN テンプレートはドーピング部分が 1.5μm 程度なので、表面か ら深さ 650nm のドライエッチングで共鳴トンネルダイオードのメサ構造が作製できていることがわかる。

井戸層	井戸層厚さ	障壁層	障壁層厚さ
GaN	$1.9\mathrm{nm}$	$Al_{0.2}Ga_{0.8}N$	2.7nm
GaN	$1.9\mathrm{nm}$	$\mathrm{Al}_{0.65}\mathrm{Ga}_{0.35}\mathrm{N}$	$4.65 \mathrm{nm}$
GaN	$1.9\mathrm{nm}$	AlN	$2.7 \mathrm{nm}$
GaN	$1.9\mathrm{nm}$	AlN	$1.9\mathrm{nm}$

表 5.1 井戸層、障壁層の厚さ



図 5.2 ドライエッチング後のメサ構造の SEM 写真

5.2 共鳴トンネルダイオードの IV 特性

前節で作製したようなメサ構造に Ti(20nm)/Au(350nm) を蒸着し、35K で IV 特性を測定したところ、図 5.3(a) のようになった。



図 5.3 障壁層 AlN 成分を変化させた場合の共鳴トンネルダイオードの IV 特性 (35K) (a)-6V~7V (b)5V~7V

この結果から、ショットキーのような特性は AlN 障壁層を挿入したからであると考えられる。また、障 壁層の高さを高くしていくとピエゾ効果が顕著になってくるので、AlN になるにつれて非対称性が増して いく。

ここで、連続的に TMG を供給し、パルスインジェクションで結晶成長した AlN 障壁層のサンプルと

Al_{0.65}Ga_{0.35}Nの障壁層のサンプルの結果が、5V~7V付近でをとっているので、この付近を拡大して測定したものが図 5.3(b)である。この部分がキャリアトラップなどでなく、サブバンドのトンネリングによる負性抵抗であることを示すために、温度を変えていき、負性抵抗部の電圧区間が変わらなければ、サブバンドのトンネリングの効果であると考えることが出来る。その測定結果を図 5.4 に示す。この結果か



図 5.4 温度を変化させたときの負性抵抗の変化

ら、この負性抵抗はキャリアトラップではなく、サブバンドのトンネリングによるものであるとわかり、 また、低温にしなければ負性抵抗が観測できない理由の一つとして、コンタクトなどの直列抵抗が大きい ためであることがわかる。これの解決方法の一つとしては電極のサイズを小さくすることなどが挙げられ る。

そこで、実際にこの負性抵抗部を用いて、キャパシタンス $C = 3.3 \mu F$ 、 $L = 1 \mu H$ の外部共振器を取り 付けて、定電圧 6V を印加してインダクタの電圧を測定したところ、図 5.5 のようになった。共振周波数



図 5.5 高周波測定 (a) 電気回路の概要図 (b) 測定結果

 $f = 1/2\pi\sqrt{LC} \simeq 800 \mathrm{kHz}$ の交流が流れるはずであるが、結果としてきちんとした交流は流れていないの

で、交流を発振の実験は失敗であった。

5.3 実験結果の考察と作製面での課題

前節では、交流の発振に失敗したことを述べた。そこで、この節では交流の発振に失敗した理由について考察する。

まず、交流に失敗した理由の一つとして、キャリアトラップが考えられる。キャリアトラップが起きているか、という判別方法として IV 特性がヒステリシスになっているか、また何回か測定を行うと IV 特性が変化していくかということで確認できる。

今回のサンプルを用いて、IV 特性のヒステリシスを確認したものが図 5.6(a) であり、数回測定することで測定結果に変化があるかを調べたものが図 5.6(b) である。そこで、このキャリアトラップが起きる原



図 5.6 キャリアトラップの確認 (a) 測定回数により受ける変化 (b) ヒステリシスの IV 特性

因として、次の現象によるものではないかと仮説を立てた。

- 1. キャップ層の低温成長において、結晶の質が悪いこと
- 2. 低温成長のため、量子井戸の結晶の質が悪いこと
- 3. ドライエッチングでキャリアのトラップが増えてしまったこと

まず、1 についてだが、キャップ層の低温 (900 ℃) 結晶成長によって結晶成長の質が悪くなったことを示 すために、1130 ℃で結晶成長した u-GaN 上に 800 ℃、900 ℃で n-GaN 結晶成長をしたサンプルと 1130 ℃で結晶成長したサンプルを比較した。結晶成長中の光の反射率測定を行うと、図 5.7 のようになった。 明らかに、低温の結晶成長では質が悪くなっていることがわかる。そして、低温にすればするほど質が悪 くなっていった。

また、このサンプルの XRD のロッキングカーブの測定結果は図 5.8 のようになった。また、ロッキング カーブの FWHM は表 5.2 のようになる。

成長温度	[002] 方向 FWHM	[102] 方向 FWHM
800 °C	296.9	336.2
900 ℃	297.0	332.9
1130 °C	217	310

表 5.2 低温 GaN テンプレートのロッキングカーブに関する FWHM 値



図 5.7 結晶成長中のレーザー (632.5nm) 反射率測定



図 5.8 GaN の低温結晶成長したサンプルの XRD 測定結果 (a)[002] 方向ロッキングカーブ (b)[102] 方向ロッキングカーブ

このことから、XRD では格子欠陥が増えて結晶の質が大きく変化しても、ロッキングカーブの FWHM 値が変わらないことから、XRD では格子欠陥の影響を観測することはできないとわかる。

次に、図 5.9、5.10 に示すようにそれぞれのサンプルについて CL を測定した。ただし、いずれも波長は 358nm とした。

この結果から、1130 °Cで結晶成長した GaN は 12.5 μ m×12.5 μ m の中に欠陥が 30 個ほど観測できるの で、格子欠陥密度は約 2×10⁷ (cm⁻²) 程度であることがわかる。

また、CLを測定すると、λ=550nm 程度の波長帯でピークが観測できる。この発光波長は窒化物青色発 光ダイオードなどに応用されており、このピーク高さを CL で調べることで格子欠陥がどの程度かを判別 することが出来る。実際に、CL の画像と SEM 写真からわかるように、欠陥数は明らかに 800 ℃の方が 多くなっているので、CL の発光スペクトルで 550nm のピーク高さも高くなっている。1130 ℃では CL の黒い部分 (発光していない部分) が欠陥を表しているのに対して、800 ℃、900 ℃では CL の白い部分 (発光している部分) が欠陥となっている。これは、下地の 1130 ℃の GaN テンプレートからの発光を観 測しているのではないかと考えられる。

この解決策として、キャップ層を TMG パルスインジェクションで結晶成長することを考えた。実際に、 1130 ℃で結晶成長した GaN テンプレートの上に 800 ℃でパルスインジェクションを用いて結晶成長し



図 5.9 CL の発光スペクトル



図 5.10 CL と表面の SEM 写真 (a)800 ℃ (b)900 ℃ (c)1130 ℃

たサンプルの XRD 結果が図 5.11 であり、表面状態の SEM 写真が図 5.12 である。

XRD は FWHM 値が [002] 方向で 244.1、[102] 方向で 294.1 であり、この結果から、キャップ層の結晶 成長にはパルスインジェクションが有効なことがわかる。さらに、キャップ層にパルスインジェクション を用いて結晶成長することで、キャップ層をハイドープ出来、空乏層領域を小さくすることができ、効率 よく電圧を印加することが出来る。そして、仮説 2 の量子井戸層の結晶の質が悪いという仮説は間違いで あることがわかる。

また、仮説3に関して、ドライエッチングにおいてキャリアがどの程度トラッピングされるかを見積も るために、1µm 程度の厚さの n-GaN テンプレートを、共鳴トンネルダイオードを作製する際に用いた Ar10sccm と Cl₂ ガス 100sccm のドライエッチングで 50µm 程度削ったものに Ti(20nm)/Au(350nm) 蒸着して、ホール測定を行った。 ホール測定の測定結果は図 5.13 のようになったが、この測定結果にお いて、室温で移動度が 200(cm²/V·s) から 100(cm²/V·s) 程度に下がっていることに注目すると、2 個中 1 個の電子がトラッピングされていると考えられる。また、室温でキャリア濃度が 5 × 10¹⁸ (/cm³) から 9 × 10¹⁸ (/cm³) に上がっているが、これはキャリアがトラッピングされたことによって、見かけのキャ



図 5.11 パルスインジェクションを用いて低温結晶成長した GaN テンプレートの XRD 結果 (a)[002] 方向 (b)[102] 方向

図 5.12 パルスインジェクションを用いて低温結晶成長した GaN テンプレートの表面 SEM 写真



図 5.13 ドライエッチング前と後のホール測定結果

問題点	解決方法
キャップ層のキャリアトラップ	PulseInjection を用いた結晶成長
ドライエッチング部のキャリアトラップ	エッチングレートを上下させる
室温で観測できない負性抵抗	電極サイズの微小化
	n-GaN 層のハイドープ

表 5.3 現時点での共鳴トンネルダイオードの作製上の問題点と解決方法

リア濃度が上がっているのか、それとも実際にキャリア濃度が上がっているのかを考えるために、温度を 変化させつつホール測を行った。もし、これがキャリア濃度が上がっているならば、移動度が下がり始め る温度が変化すると考えられる。なぜなら、キャリア濃度が高くなるとイオン化不純物散乱が大きくなる ため、フォノン散乱の影響が相対的に少なくなり、 $T^{\frac{3}{2}}$ に比例して移動度が下がっていくと考えられるためである。

以上をまとめると、作製面において表 5.3 の問題点とその解決方法が考えられる。

第6章

ISBT を用いた量子井戸の結晶成長評価と 共鳴トンネルダイオード特性の解析

窒化物の共鳴トンネルダイオードを MOVPE 法で製作するために、結晶成長に関して ISBT を用いて 評価を行った。そこで、この章では ISBT に関するシミュレーションにより、フィッティングを行い結晶 の量子井戸界面などを評価した結果について述べる。

6.1 サブバンド間エネルギー準位のシミュレーション

この節ではサブバンド間のエネルギー準位に関するシミュレーションを説明する。 現在、MQW を評価する手段としては表 6.1 のようなものが挙げられる。

Method	Advantage	Disadvantage
XRD	簡易的な手法で観測可能	界面急峻性に対して変化が少ない
PL	発光を得ることが容易	定量的に測定不可能
ISBT	量子井戸の結晶性を定量的に測定可能	測定が困難

表 6.1 量子井戸の評価法

PL では、波数方向の分散が図 6.1 のような波数方向に分散が存在するため、発光強度を観測したときの 半値幅は結晶の量子井戸方向のばらつきと関係性が少なくなる。一方で、XRD や ISBT は半値幅で結晶 の量子井戸方向の厚さのばらつきを判断出来る。実際に量子井戸幅を変化させつつ ISBT を測定した結果 が図 6.2 である。この結果から、本来 ISBT は LO フォノン緩和が主な要因であるため、緩和時間がとて も速いのが一つの特徴であると言える。ハイゼンベルグの不確定性原理より半値幅は数+ meV であるは ずだが、実際には図 6.2 のように半値幅は 200meV 以上ある。これは結晶による影響ではないかと考え た。そこで、量子井戸層の結晶性がより半値幅に関わっている方を調べるために、第四章でアニーリング して ISBT が消えたもので XRD を測定してみたところ、図 6.4 のようになった。この結果から、ISBT の方が XRD の半値幅で見たときよりも界面急峻性による影響が強いことがわかる。そこで、実際に界面 急峻性がどの程度かを調べるために、次のような GaN と AIN の間の界面急峻性を表すパラメータ d と、 量子井戸方向の厚さの分散 σ というパラメータを導入した。この界面急峻性は実際の TEM 写真で黒色 (AIN) と灰色 (GaN) の間の部分となっている。この界面急峻性の影響は図 6.5 のようにサブバンド間の エネルギーを小さくする方に働く。界面急峻性 d のパラメータを変化させていったとき、図 6.7 のように



図 6.1 PL の発光のエネルギー分散関係



図 6.2 井戸層の厚さを変化させたときの ISBT の変化



図 6.3 高温での界面急峻性の影響 (a) XRD (b) ISBT の測定結果


図 6.4 (a) 界面急峻性 d と量子井戸方向の厚さの分散 σ の概念図 (b)GaN/AlN MQW の TEM 写真



図 6.5 量子井戸界面急峻性がサブバンド間のエネルギーに与える影響

なり、量子井戸の幅が小さいときに界面急峻性は大きく効き、ISBT による吸収のエネルギーが小さく、 すなわち吸収される波長が長くなっていることがわかる。

ただし、ここでポアソン方程式でなく、井戸層と障壁層で分極のつりあいから求めたものからピエゾ分極 の効果を求めた。実際に、この仮定が成立していることを検証するために、図 6.6 のように、全体でポア ソン方程式を数値計算したものと分極のつりあいからバンド図を描いたもので比較した。この結果におい て、少しずれているのはプロットの分割数の問題であり、それを除くとおおよそ一致しているため、この 仮定は正しいことがわかる。また、この界面急峻性のパラメータを用いて、ISBTの実験結果とフィッ



図 6.6 ポアソン方程式によるバンド計算と分極のつり合いによるバンド計算の比較

ティングをしたところ、図 6.8 のようになり、GaN と AlN の界面急峻性 d は d = 1.2nm であることが わかる。



図 6.7 量子井戸界面急峻性がサブバンド間のエネルギーに与える影響



図 6.8 シミュレーションによる実験値とのフィッティング

6.2 ISBT の吸収スペクトルのシミュレーションと量子井戸幅の分散

結晶の量子井戸層の厚さの分散を評価するために

$$h(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x - \epsilon) g(\epsilon) d\epsilon$$

という畳み込み積分を導入した。すなわち、ある吸収波長のエネルギーを中心として畳み込みの積分を行 うというものである。実際に、量子井戸の厚さでガウス分布、緩和時間 r によってハイゼンベルグの不確 定性原理からエネルギーの分散がローレンツ関数になると仮定した。ここで、量子井戸方向の厚さのばら つきがガウス分布であるとすると、図 6.5 のフィッティング結果からエネルギーを横軸にとると、非対称 性が現れる。この非対称性と対称性のスペクトルの畳み込み関数となっていることから、実際の ISBT の スペクトルで非対称性が観測できるのではないかと考えた。

そこで、まずローレンツ関数

$$\Gamma\left(\epsilon\right) = \frac{\frac{\gamma}{\pi}}{\left(\epsilon - \epsilon_{0}\right)^{2} + \gamma^{2}}$$

において、図 6.10(a) のように、フォノン散乱のシミュレーションをして緩和時間を求めて、ハイゼンベル グの不確定原理から γ、およびローレンツ関数を求めた。また、このときの振動子強度は図 6.10(b) のよ



図 6.9 フォークト関数の畳み込みの概念図

うになった。この結果から、このガウス分布のパラメーターである量子井戸幅の分散 σ を用いて、ISBT



図 6.10 フォノン散乱時間と温度の関係性

の測定結果とシミュレーションをフィッティングしたものを図 6.11 に示す。この結果から、 $\sigma=0.35$ nm であると評価できる。さらに、このシミュレーションから求めたキャリア濃度とパルスインジェクショ



図 6.11 ISBT の吸収スペクトルのフィッティング

ンで結晶成長した n-GaN テンプレートの SIMS 測定、およびホール測定の結果とオーダーで合っている

か、という妥当性を調べたものを図 6.12 のようになる。

図 6.12 の結果から、ホール測定でのキャリア濃度は 1×10¹⁹ (/cm³) のオーダーになっており、シミュ



図 6.12 パルスインジェクションで結晶成長を行った GaN の SIMS 測定、ホール測定結果 (左図) キャリア濃度を変えたときの ISBT 光吸収の測定結果

レーションの結果は妥当であるとわかる。また、

$$SiH_4/TMG = 5.48 \times 10^{-5} \rightarrow N_{simulation} = 5.0 \times 10^{18} (/cm^3)$$

 $SiH_4/TMGa = 9.14 \times 10^{-5} \rightarrow N_{simulation} = 1.2 \times 10^{19} (/cm^3)$

となっており、この結果から、SIMS 測定からキャリア濃度がおおよそカーボン濃度とシリコン濃度の差 になっており、これは第四章で述べたように、カーボンがホールの役割を果たしていることが考察される。 そこで、量子井戸幅の分散のパラメーターσを変化させると、図 6.13 のようになり、σが小さくなると、 量子井戸幅のガウス分布を反映した非対称形からローレンツ分布に対応した対称形になることが予測で きる。



図 6.13 量子井戸幅の変化に応じた吸収スペクトルの変化

6.3 共鳴トンネルダイオードの解析

この節では前節のフィッティングした結果から求めた界面急峻性を踏まえ、それが共鳴トンネルダイ オードの負性抵抗特性にどのように影響を与えるのかについて述べる。

前節で求めた界面急峻性の長さ 1.2nm を全体のバンドラインナップに含めると図 6.14 のようになる。そ



図 6.14 界面急峻性がバンドラインナップに与える影響

こで、このバンドラインナップを基に伝達行列を用いた方法でトンネリングのシミュレーションを行った ところ、図 6.15 のようになった。この結果より、界面急峻性が大きくなると、共鳴トンネルダイオード



図 6.15 界面急峻性が負性抵抗特性に与える影響

の性能の一つである PV 比が小さくなってしまうことがわかる。さらに、負性抵抗部分のピーク時の電圧 とバレー時の電圧の差も大きくなってしまう。これは界面急峻性が悪くなるため、結果的に AlN の成分 が少なくなってしまうため、実行的な障壁層のポテンシャル高さが小さくなるためであると考えられる。

第7章

結論

先行研究として、作製されてきた窒化物を用いた共鳴トンネルダイオードは MOVPE で作製したテンプ レートや GaN 基板の上に MBE で結晶成長するものが多く、量産に適した有機金属気相成長 (MOVPE) で作製した GaN/AlN 界面の組成分布は急峻でなく、全て MOVPE で作製した素子は期待通りの特性を 示さない可能性がある。そこで私は、初めて MOVPE 法特有の界面急峻性を考慮した共鳴トンネルダイ オードのシミュレーション法を提案し、共鳴トンネルダイオードの設計指針の確立に向けて検討・試作・ 評価を総括的に行うことにした。したがって、本研究の立ち位置として、「MOVPE 法を用いた窒化物共 鳴トンネルダイオードによるテラヘルツ発振の実現に向けた最初の一歩」と定め、この目標の為にボトル ネックとなる以下 4 点を実証することにした。

- 1. 全て MOVPE 法を用いて共鳴トンネルダイオード構造の結晶成長を行う
- 2. 窒化物のプロセスを確立し、メサ構造を作製して負性抵抗特性を観測する
- 界面の組成非急峻性を GaN/AlN 量子井戸のサブバンド間遷移 (Intersubband transition: ISBT) によるスペクトルの測定と理論解析による評価
- 4. 界面組成非急峻性を RTD 構造のバンド計算に反映させ、負性抵抗がどのようになるか

そこで、本研究の目的を「MOVPE 法を用いた窒化物共鳴トンネルダイオードの作製、解析」とし、一つ 一つ課題を解決していった。

第四章では窒化物の結晶成長の条件、また、それを加工するプロセスの条件を調べ、窒化物を用いた共鳴 トンネルダイオード構造の作製に成功した。

第五章では実際に第四章で議論した条件で MOVPE 法により作製された共鳴トンネルダイオードで IV 特性を測定し、負性抵抗の確認に成功した。

第六章では界面の組成非急峻性を GaN/AlN 量子井戸のサブバンド間遷移 (Intersubband transition: ISBT) によるスペクトルの測定と理論解析による評価を確立し、バンド計算に結晶性のパラメータを含めることに成功した。

以上をまとめると、GaN/AIN 多重量子井戸においてまず、吸収スペクトルから、この吸収が ISBT に由 来するものだと確認し、その吸収スペクトルから、界面組成の非急峻性を定量的に見積もり、バンドライ ンナップの補正を行った。また、そのバンドラインナップを補正したもので共鳴トンネルダイオードの負 性抵抗特性を計算することが出来、これは今後、共鳴トンネルダイオードの設計指針に有効であることを 示唆した。

本研究の今後の課題として、共鳴トンネルダイオードの作製上の問題点としては、メインではキャリアト ラップによるヒステリシスの問題があり、具体的には

1. キャップ層のキャリアトラップの影響

2. ドライエッチングによるキャリアトラップの影響

が挙げられ、サブの問題としてキャップ層のハイドーピングが出来ていないため、空乏層領域が伸びてし まい、高電圧を印加しなければならないことと、金属電極の大きさが大きいため高抵抗が直列抵抗として 存在し、低温にしなければならないことが挙げられる。そこで、その課題の解決方法として

- パルスインジェクションを用いたキャップ層の結晶成長 (キャリアトラップ、ハイドープの問題の 解決)
- 2. TMG でなく、TEG を用いた結晶成長 (ハイドープの問題の解決)
- 3. エッチングガスをコントロールし、徐々にドライエッチングを行う(キャリアトラップの解決)
- 4. 金属電極の微細化プロセス

が挙げられる。

また、シミュレーションの問題として

- 1. 相対的でなく、絶対的な値での電流密度に関するシミュレーション
- 2. トンネリングの影響を含めたバンドラインナップに関するシミュレーション
- 3. キャリアトラップに関する電子輸送のシミュレーション

を確立しなければならない。この課題解決方法として

- 1. 電極を含めた電磁場の解析
- 2. Drift-Diffusion にモデルの改良
- 3. モンテカルロ法を用いたキャリアトラップ現象の解析

が挙げられる。

最後に本研究が THz 発振の実用化に向けた第一歩として、今回得られた結果およびプロセスが次のス テップに繋がる材料となり、最終的に実用化されることで人々の生活に役立たれることを期待する。

付録A

Appendix A

A.1 電子格子相互作用の遷移確率に関する式変形

第二章四節において、フェルミの黄金則を用いてフォノンを放出することによる電子格子相互作用にお ける電子の遷移確率は

$$W_{e^--phonon} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{n,n'} \sum_{\boldsymbol{q}} \left| \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle \right|^2 \delta \left(\left(E_{n'} + \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}}^{\prime 2}}{2m} \right) + \hbar \omega_{LO} - \left(E_n + \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}}^2}{2m} \right) \right)$$

と表された。

ここで、 $\mathbf{r}_{xy} = (\mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_x) \mathbf{e}_x + (\mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_y) \mathbf{e}_y$ とすると、

$$\begin{split} \langle f \left| V \right| i \rangle &= \left\langle f \left| \sum_{q} \frac{1}{q} \sqrt{\frac{e^2}{2V\epsilon_0}} E_{LO} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{st}} \right)} a_q^{\dagger} e^{-iq \cdot r} \right| i \right\rangle \\ &= \frac{1}{A} \left\langle \alpha_f \left| \sum_{q} \frac{1}{q} \sqrt{\frac{e^2}{2V\epsilon_0}} E_{LO} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{st}} \right)} a_q^{\dagger} e^{-iq \cdot r} \right| \alpha_i \right\rangle \\ &= \frac{1}{A} \sqrt{\frac{e^2 E_{LO}}{2V\epsilon_0}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{st}} \right) \sqrt{N_q + 1} \int dr \sum_{q} \frac{1}{q} e^{-ik'_{xy} \cdot r_{xy}} e^{-iq \cdot r} e^{ik_{xy} \cdot r_{xy}} \varphi_{n'}^* (z) \varphi_n (z) \\ &= \frac{1}{A} \sqrt{\frac{e^2 E_{LO}}{2V\epsilon_0}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{st}} \right) \sqrt{N_q + 1} \int dr \sum_{q} \frac{1}{q} e^{-ik'_{xy} \cdot r_{xy}} e^{-i(q_z + q_{xy}) \cdot r} e^{ik_{xy} \cdot r_{xy}} \varphi_{n'}^* (z) \varphi_n (z) \\ &= \frac{1}{A} \sqrt{\frac{e^2 E_{LO}}{2V\epsilon_0}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{st}} \right) \sqrt{N_q + 1} \int dz \int dr_{xy} \sum_{q} \frac{1}{q} e^{i(k_{xy} - k'_{xy} - q_{xy}) \cdot r_{xy}} e^{-iq_z z} \varphi_{n'}^* (z) \varphi(z) \\ &= \frac{1}{A} \sqrt{\frac{e^2 E_{LO}}{2V\epsilon_0}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{st}} \right) \sqrt{N_q + 1} \sum_{q} \int dz \frac{1}{q} e^{-iq_z z} \varphi_{n'}^* (z) \varphi_n (z) A\delta \left(k_{xy} - k'_{xy} - q_{xy} \right) \\ &= \sqrt{\frac{e^2 E_{LO}}{2V\epsilon_0}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{st}} \right) \sqrt{N_q + 1} \sum_{q} \int dz \frac{1}{q} e^{-iq_z z} \varphi_{n'}^* (z) \varphi_n (z) \delta \left(k_{xy} - k'_{xy} - q_{xy} \right) \\ &= \sqrt{\frac{e^2 E_{LO}}{2V\epsilon_0}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{st}} \right) \sqrt{N_q + 1} \sum_{q} \int dz \frac{1}{q} e^{-iq_z z} \varphi_{n'}^* (z) \varphi_n (z) \delta \left(k_{xy} - k'_{xy} - q_{xy} \right) \\ &= \sqrt{\frac{e^2 E_{LO}}{2V\epsilon_0}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{st}} \right) \sqrt{N_q + 1} \sum_{q} \int dz \frac{1}{q} e^{-iq_z z} \varphi_{n'}^* (z) \varphi_n (z) \delta \left(k_{xy} - k'_{xy} - q_{xy} \right) \\ &= \sqrt{\frac{e^2 E_{LO}}{2V\epsilon_0}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{st}} \right) \sqrt{N_q + 1} \sum_{q} \int dz \frac{1}{q} e^{-iq_z z} \varphi_{n'}^* (z) \varphi_n (z) \delta \left(k_{xy} - k'_{xy} - q_{xy} \right) \\ &= \sqrt{\frac{e^2 E_{LO}}{2V\epsilon_0}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{st}} \right) \sqrt{N_q + 1} \sum_{q} \int dz \frac{1}{q} e^{-iq_z z} \varphi_{n'}^* (z) \varphi_n (z) \delta \left(k_{xy} - k'_{xy} - q_{xy} \right) \\ &= \sqrt{\frac{e^2 E_{LO}}{2V\epsilon_0}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{st}} \right) \sqrt{N_q + 1} \sum_{q} \int dz \frac{1}{q} e^{-iq_z z} \varphi_{n'}^* (z) \varphi_n (z) \delta \left(k_{xy} - k'_{xy} - q_{xy} \right)$$

従って、

$$W_{e^--phonon} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{n,n'} \sum_{\boldsymbol{q}} |\langle f | V | i \rangle|^2 \delta\left(\left(E_{n'} + \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}}^{\prime 2}}{2m} \right) + \hbar\omega_{LO} - \left(E_n + \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}}^2}{2m} \right) \right)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2 E_{LO}}{2V\epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{st}} \right) (N_q + 1) \sum_q \left| \frac{\int dz e^{-i\boldsymbol{q}_z z} \varphi_{n'}^*(z) \varphi_n(z)}{q} \right|^2$$

$$\times \delta \left(\boldsymbol{k}_{xy} - \boldsymbol{k}'_{xy} - \boldsymbol{q}_{xy} \right) \delta \left(E_{n'} + E_{\boldsymbol{k}'_{xy}} + \hbar\omega_{LO} - E_n - E_{\boldsymbol{k}_{xy}} \right)$$

$$= \frac{\pi e^2 \omega_{LO}}{V\epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{st}} \right) (N_q + 1) \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 q \frac{\left| \int dz e^{-i\boldsymbol{q}_z z} \varphi_{n'}^*(z) \varphi_n(z) \right|^2}{q_{xy}^2 + q_z^2}$$

$$\times \delta \left(E_{n'} + E_{\boldsymbol{k}'_{xy}} + \hbar\omega_{LO} - E_n - E_{\boldsymbol{k}_{xy}} \right) (\because E_{LO} = \hbar\omega_{LO})$$

$$= \frac{e^2 \omega_{LO}}{8\pi^2 \epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{st}} \right) (N_q + 1)$$

$$\times \int \int d\theta dq_{xy} \left(q_{xy} I_{2D}(\boldsymbol{q}) \times \delta \left(E_{n'} + E_{\boldsymbol{k}'_{xy}} + \hbar\omega_{LO} - E_n - E_{\boldsymbol{k}_{xy}} \right) \right)$$

ただし、

$$I_{2D}\left(\boldsymbol{q}\right) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dq_{z} \frac{\left|\int dz e^{-iq_{z}z} \varphi_{n'}^{*}\left(z\right) \varphi_{n}\left(z\right)\right|^{2}}{q_{xy}^{2} + q_{z}^{2}}$$
$$= \int dz dz' \varphi_{n'}^{*}\left(z\right) \varphi_{n}\left(z\right) \varphi_{n'}^{*}\left(z'\right) \varphi_{n}\left(z'\right) \int_{-\infty}^{\infty} dq_{z} \frac{e^{-iq_{z}\left(z-z'\right)}}{q_{xy}^{2} + q_{z}^{2}}$$

とした。ここで、 q_z に関する積分を解くために、図 A.1 のような経路 C_R で複素積分

$$\oint_{C_R} \frac{e^{-i\alpha z}}{z^2 + q_{xy}^2} dz \, (\alpha > 0)$$

を考える。



図 A.1 経路 C_R の積分路 (半径 R の半円)

ジョルダンの補題より、 $R \to \infty$ として、半径 Rの円で複素積分の積分路をとると、

$$\lim_{R \to \infty} \int_{z=Re^{i\theta}, \theta=0 \to -\pi} e^{-i\alpha z} f(z) \, dz = 0 \, (\alpha > 0)$$

となるので、この積分経路の中の極は $z = -iq_{xy}$ のみであるから、留数定理より、時計回りの経路積分であることに注意して

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\alpha q_z}}{q^2 + q_{xy}^2} dq_z = \oint_{C_R} \frac{e^{-i\alpha z}}{z^2 + q_{xy}^2} dz = -2\pi i Res \left[z = -iq_{xy}; \frac{e^{-i\alpha z}}{z^2 + q_{xy}^2} \right]$$
$$= -2\pi i \lim_{z \to -iq_{xy}} \left(z + iq_{xy} \right) \left(\frac{e^{-i\alpha z}}{z^2 + q_{xy}^2} \right) = \frac{\pi}{q_{xy}} e^{-q_{xy}(z-z')}$$

いま、z - z' > 0の場合に関して考えたが、z - z' < 0のときも同様にして、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq_z \frac{e^{-iq_z(z-z')}}{q_{xy}^2 + q_z^2} = \frac{\pi}{q_{xy}} e^{-q_{xy}(z'-z)}$$

すなわち、すべての*z-z*'に対して、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq_z \frac{e^{-iq_z(z-z')}}{q_{xy}^2 + q_z^2} = \frac{\pi}{q_{xy}} e^{-q_{xy}|z-z'|}$$

なので、

$$I_{2D}\left(\boldsymbol{q}\right) = \int dz dz' \varphi_{n'}^{*}\left(z\right) \varphi_{n}\left(z\right) \varphi_{n'}^{*}\left(z'\right) \varphi_{n}\left(z'\right) \frac{\pi}{q_{xy}} e^{-q_{xy}\left|z-z'\right|}$$
(A.1)

となる。次に、エネルギー保存則に由来する項 $\delta\left(E_{n'}+E_{k'_{xy}}+\hbar\omega_{LO}-E_n-E_{k_{xy}}\right)$ を考える。 δ 関数 の中身は0 でなければいけないので、運動量保存則 $q_{xy} = k_{xy} - k'_{xy}$ より

$$E_{n'} + E_{k'_{xy}} + \hbar\omega_{LO} - E_n - E_{k_{xy}} = 0$$
$$\hbar\omega'_e + E_{k_{xy}-q_{xy}} - E_{k_{xy}} = 0$$

ただし、 $\hbar\omega'_e \equiv \hbar\omega_{LO} - (E_n - E_{n'})$ とした。ここで、 $E_{\mathbf{k}'_{xy}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}'^2_{xy}}{2m}$ 、 $E_{\mathbf{k}_{xy}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2_{xy}}{2m}$ より \mathbf{k}_{xy} と \mathbf{q}_{xy} の成す角を θとして、

$$\begin{split} \hbar\omega_e' + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\mathbf{k}_{xy}^2 - 2 \left| \mathbf{k}_{xy} \right| \left| \mathbf{q}_{xy} \right| \cos \theta + \mathbf{q}_{xy}^2 \right) - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{xy}^2}{2m} &= 0 \\ \hbar\omega_e' - \frac{\hbar^2}{m} \left| \mathbf{k}_{xy} \right| \left| \mathbf{q}_{xy} \right| \cos \theta + \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{q}_{xy}^2 &= 0 \\ \left| \mathbf{q}_{xy} \right|^2 - 2 \left| \mathbf{k}_{xy} \right| \left| \mathbf{q}_{xy} \right| \cos \theta + \frac{2m\omega_e'}{\hbar} &= 0 \\ \left| \mathbf{q}_{xy} \right|_{\pm} &= \left| \mathbf{k}_{xy} \right| \cos \theta \pm \sqrt{\left| \mathbf{k}_{xy} \right|^2 \cos^2 \theta - \frac{2m\omega_e'}{\hbar}} \\ \left| \left| \mathbf{q}_{xy} \right|_{\pm} - \left| \mathbf{q}_{xy} \right|_{-} \right| &= 2\sqrt{\left| \mathbf{k}_{xy} \right|^2 \cos^2 \theta - \frac{2m\omega_e'}{\hbar}} \\ \\ \sum \delta \left(x - x_i \right) \end{split}$$

ここで、 δ 関数に関する公式 $\delta(f(x)) = \sum_{i} \frac{\delta(x-x_i)}{|f'(x_i)|} (x_i \ \mathrm{lt} \ f(x) = 0 \ \mathrm{c}$ 満たす)を用いて、

$$\delta\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left|\boldsymbol{q}_{xy}\right|^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\left|\boldsymbol{k}_{xy}\right|\left|\boldsymbol{q}_{xy}\right|\cos\theta + \hbar\omega'_e\right)$$

$$= \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{\left|\sqrt{\left|\boldsymbol{k_{xy}}\right|^2 \cos^2 \theta - \frac{2m\omega'_e}{\hbar}\right|}} \left(\delta\left(\left|\boldsymbol{q}_{xy}\right| - \left|\boldsymbol{q}_{xy}\right|_+\right) + \delta\left(\left|\boldsymbol{q}_{xy}\right| - \left|\boldsymbol{q}_{xy}\right|_-\right)\right)\right)$$
$$= \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{\left|\left|\boldsymbol{q}_{xy}\right|_+ - \left|\boldsymbol{q}_{xy}\right|_-\right|} \left(\delta\left(\left|\boldsymbol{q}_{xy}\right| - \left|\boldsymbol{q}_{xy}\right|_+\right) + \delta\left(\left|\boldsymbol{q}_{xy}\right| - \left|\boldsymbol{q}_{xy}\right|_-\right)\right)$$

となるので、 $W_{e^--phonon}$ は

$$\begin{split} W_{e^--phonon} &= \frac{e^2 \omega_{LO}}{8\pi^2 \epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_{st}} \right) (N_q + 1) \frac{2m}{\hbar^2} \\ &\times \int_0^{2\pi} d\theta \int \frac{1}{\left| |\boldsymbol{q}_{xy}|_+ - |\boldsymbol{q}_{xy}|_- \right|} dq_{xy} q_{xy} I_{2D} \left(\boldsymbol{q}_{xy} \right) \\ &\times \left(\delta \left(|\boldsymbol{q}_{xy}| - |\boldsymbol{q}_{xy}|_+ \right) + \delta \left(|\boldsymbol{q}_{xy}| - |\boldsymbol{q}_{xy}|_- \right) \right) \\ &= \frac{e^2 \omega_{LO} m}{4\pi^2 \hbar^2 \epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_{st}} \right) (N_q + 1) \\ &\times \int_0^{2\pi} d\theta \int \frac{1}{\left| |\boldsymbol{q}_{xy}|_+ - |\boldsymbol{q}_{xy}|_- \right|} dq_{xy} q_{xy} I_{2D} \left(\boldsymbol{q}_{xy} \right) \\ &\times \left(\delta \left(|\boldsymbol{q}_{xy}| - |\boldsymbol{q}_{xy}|_+ \right) + \delta \left(|\boldsymbol{q}_{xy}| - |\boldsymbol{q}_{xy}|_- \right) \right) \end{split}$$

である。

付録 B

B.1

Appendix B

窒化物の物性定数

AlN GaN InN sapphire a_0 [Å] 4.7583.1123.1893.533 c_0 [Å] 4.9825.1865.69312.9911.624 c_0/a_0 1.6011.611Bond length $R_{metal-N_1}u_0$ [Å] [2] 1.8922.1561.9490.7980.379 u_0/c_0 0.376Bohr radius a_0 [3] 5.8146.0406.660Electron mass $0.4 m_0$ $0.2 m_0$ $0.11 m_0$ Monolayer thickness [Å](bulk) 2.592873Optical phonon [meV] 9991.2

	$\epsilon_o(0)$	$\epsilon_o(\infty)$	$\epsilon_e(0)$	$\epsilon_e(\infty)$	n
GaN	9.28	5.18	10.2	5.31	2.3 - 2.335
AlN	7.76	4.160	9.32	4.35	2.03 - 2.15

図 B.1 窒化物の物性定数

参考文献

- [1] M. R. QUERRY et al., "HANDBOOK OF OPTICAL CONSTANTS OF SOLIDS II"
- [2] B. B. Hu and M. C. nuss Opt. Lett. 20, 1716 (1995)
- [3] Daniel Clery, Science **297**, 761 (2002)
- [4] Optics Express, Vol. 11, Issue 20, pp.2549-2554 (2003)
- [5] T.Kumer, "IEEE 802 15-13-0130-01-0thz Launching"
- [6] http://spectrum.ieee.org/aerospace/military/the-truth-about-terahertz
- [7] W.T.Read "A Proposed High-Frequency, Negative-Resistance Diode," Bell Syst. Tech. J., 37, 401 (1958)
- [8] J. Nishizawa and Y. Watanabe "High Frequency Properties of the Avalanching Negative Resistance diode", Sci. Rep. Res. Inst. Tohoku. Univ. B-(Comm), Sendai, Japan, Vol.10, No.2, pp.91-pp.108 (1958)
- [9] K.Mizuno and K.Suto "THz Coherent Sources and Their Applications," 電子情報通信学会技術 研究報告電子デバイス研究会, ED2004-244, pp.17-22(2005)
- [10] J. B. Gunn et al., Solid State Cummun 1, 88(1963)
- [11] H.Eisele et al., Electron Lett. 34, 2412(1998)
- [12] T.C.L.G. Sollner et al., "Quantum well oscillators," Appl. Phys. Lett. 45, (12) (1984)
- [13] S. Suzuki et al., "共鳴トンネルダイオードを用いたテラヘルツ発振器における最近の進捗と今後の展望,"電子デバイス研究会 (ミリ波・テラヘルツ波デバイス・システム) (2013)
- [14] G.Ramian et al., "The new UCSB free-electron lasers," Nucl. Inst. And Meth. A316, pp.225pp.229(1992)
- [15] R. F. Kazainov et al., Fiz. Tekh. Poluprovodn, 5, 797 (1971)
- [16] J. Faist et al., "Quantum Cascade Laser," Science, 264, 553 (1994)
- [17] J. Faist et al., Appl. Phys. Lett, 66, 538 (1995)
- [18] J. Faist et al., Appl. Phys. Lett, 67, 3057 (1995)
- [19] A. Wadeet al. "Magnetic field assisted terahertz quantum cascade laser operating up to 225 K," Nature Photonics, (2009)
- [20] D. H. Auston et al., Appl. Phys. Lett, 45, 3 (1984)
- [21] S. Komiyama et al., Phys. Rev. Lett, 48, 271(1982)
- [22] R. Tsu and L. Esaki "Tunneling in a finite superlattice," Appl. Phys. Lett., 22, 562 (1973)
- [23] L. L. Chang et al., Appl. Phys. Lett, 24, 593 (1974)
- [24] http://userweb.eng.gla.ac.uk/douglas.paul/RTD.html
- [25] T.C.L.G. Sollner et al., Appl. Phys. Lett. 43, 588 (1983)

- [26] T. J. Shewchuck et al., Appl. Phys. Lett. 47, 986 (1985)
- [27] E. R. Brown et al., Appl. Phys. Lett. 50, 83 (1987)
- [28] E. R. Brown et al., Appl. Phys. Lett. 58, 2291 (1991)
- [29] D.J. Paul, P. See, I.V. Zozoulenko, K.-F. Berggren, B. Holla "nder, S. Mantl, N. Griffin, B.P. Coonan, G. Redmond, G.M. Crean "n-type Si/SiGe resonant tunnelling diodes" Materials Science and Engineering B89, 26-29 (2002)
- [30] N. Shimizu et al., Jpn. J. Appl. Phys 36, 330 (1997)
- [31] A. Kikuchi et al., Appl. Phys. Lett. 81, 1729 (2002)
- [32] A. E. Belyaev et al., Appl. Phys. Lett 83, 3626 (2003)
- [33] Bayram C et al., Appl. Phys. Lett 97, 181109 (2010)
- [34] Zainal N et al., Appl. Phys. Lett. 97, 112102 (2010)
- [35] Lin' an Yang et al., Appl. Phys. Lett. 99, 153501 (2011)
- [36] C. Sirtori et al., Pys. Rev. B. 50, 8663 (1994)
- [37] P. Rinke et al., J. Phys.: Condens. Matter 89, 161919(2006)
- [38] O. Ambacher et al., Appl. Phys. Lett 14, 3399 (2002)
- [39] I. Vurgaftman and J. R. Meyer. "Band parameters for nitrogen-containing semiconductors." J. Appl. Phys. 94 (6):3675-3696, 2003.
- [40] P. F. Fewster, N. L. Andrew, and C. T. Foxon, "Microstructure and composition analysis of group III nitrides by X-ray scattering," J. Crystal Growth 230, 398 (2001)
- [41] Hassanet Sodabanlu et al., Appl. Phys. Lett 95, 161908(2009)

謝辞

この場をお借りして、本研究を遂行する上でお世話になった方々にお礼の言葉を述べさせて頂きます。 担当指導教官である中野義昭教授にはミーティングの際、多大なアドバイス、的確なご指摘を頂きまし た。杉山正和准教授にはお忙しい中、頻繁に打ち合わせの時間を確保してくださり、考察すべきポイント を的確にご教授頂きました。また、学術雑誌や学会に提出する文書の表現方法や構築を細やかにご指導頂 き、大変参考になりました。種村拓夫准教授、渡辺健太郎助教には、中間発表等のスライド構成について 的確なご指摘を頂き、大変感謝しております。久保田雅則助教には、武田先端知クリーンルームで実験 を行う際に幾度となく使用方法をご指導して頂きました。肥後昭男助教 (現:東北大学) には駒場のあらゆ る管理をして頂き、研究外の生活でも大変お世話になりました。ソダーバンル ハッサネット助教には、 MOVPE、その他クリーンルームの装置の操作において多くの手助けをして頂き、誠にありがとうござい ます。同期の瀬能 未奈都、瀧 勇也、中村 亮裕、野尻 悠平には、切磋琢磨して互いに励まし合い、 研究に弾みをつけることができたことに大変感謝しております。

その他,中野・杉山・種村研究室のメンバーをはじめ,研究に関わってくださった全ての方々に心より感 謝申し上げます.

最後に、これまで心身ともに支えてくださいました家族、友人に深く感謝いたします。

2014年2月 伊藤 成顕

本研究に関する発表等

国際会議

 <u>Naruaki Itoh</u>, Hassanet Sodabanlu, Masakazu Sugiyama and Yoshiaki Nakano "Simulation of intersubband transition in GaN-AlN multiple quantum wells", 12th International Conference on Intersubband transition in quantum wells (ITQW 2013)

国内会議

- [1] <u>伊藤成顕</u>, ソダーバンルー ハッサネット, 杉山 正和, 中野 義昭, 「GaN/AIN を 用いたサブバンド間遷移光吸収のシミュレーション」, 第 59 回応用物理学関係連合講 演会(同志社大学), 2013 年 9 月
- [2] 伊藤成顕, ソダーバンルー ハッサネット, 杉山 正和, 中野 義昭, 「未開拓 THz 帯 レーザ開発に向けたサブバンド間遷移に関する研究」, 第 23 回日本赤外線学会研究会 (防衛大学), 2013 年 11 月
- [3] 伊藤成顕, ソダーバンルー ハッサネット, 杉山 正和, 中野 義昭, 「MOVPE 法による GaN/AIN 共鳴トンネルダイオード構造の作製-窒化物量子井戸構造の解析-」, 電子デバイス研究会 一機能ナノデバイスおよび関連技術 (北海道大学), 2014 年 2 月(予定)