

(Al,Ga)N 系歪み量子構造の電子状態計算

Electronic band calculation of strained AlGaN-based quantum structures

京大院・工 ○石井良太, 船戸充, 川上養一

Dept. Electron. Sci. & Eng., Kyoto Univ. ○R. Ishii, M. Funato, Y. Kawakami

E-mail: kawakami@kuee.kyoto-u.ac.jp

紫外から緑色領域の広範な波長領域において、窒化物半導体を用いた発光ダイオードやレーザーダイオードが商用化されている。窒化物半導体の物性限界を考慮すると、発光(発振)波長領域のさらなる拡大が可能であり、世界中で盛んに研究されている。この課題達成に向けて、結晶成長技術やデバイス作製技術の深化、そしてデバイス構造の最適化および新たな原理の利用が検討されている。例えば、非極性面上への結晶成長、ナノ構造の作製、およびポラリトン凝縮などである。

さて、これらの効果を非第一原理的に見積もるためには、物性定数を正確に分かっている必要がある。これまでに、文献 [1] の物性定数を用いた窒化物半導体の電子状態計算は数多く報告されている。しかしながら、我々は、GaN と AlN の励起子の一軸性応力応答が、文献 [1] の物性定数では記述できないことを見出した [2,3]。GaN と AlN の電子状態を文献 [1] の物性定数で記述できない以上、AlGaN の電子状態は再評価される必要がある。ここでは、AlGaN の電子状態を我々が提示する物性定数を用いて計算し、従来の計算結果との差異について述べる。

図 1 に複数の物性定数セットを用いて計算した、 r 面 AlGaN/AlN 歪み量子井戸構造における面内偏光度 $\rho = (I_y - I_x)/(I_y + I_x)$ を示す。 $\rho = +1$ のときは $E \perp c$ 偏光、 $\rho = -1$ のときはそれに垂直な偏光を有している。活性層である AlGaN は AlN にコヒーレントに成長し、量子井戸は無限障壁を仮定した。計算に必要な物性定数は GaN と AlN の値を線形補間している。図 1 より、それぞれの物性定数セットで予測される面内偏光度は大きく異なっていることが分かり、物性定数を吟味することの重要性を示している。発表では、いくつかの面方位において、面内偏光度や面外偏光度、価電子帯スプリットなどを計算することで、紫外高効率発光に向けた (Al,Ga)N 系歪み量子井戸構造の設計指針を提示する。

参考文献

- [1] I. Vurgaftman and J. R. Meyer, *J. Appl. Phys.* **94**, 3675 (2003).
 [2] R. Ishii, A. Kaneta, M. Funato, Y. Kawakami, and A. A. Yamaguchi, *Phys. Rev. B* **81**, 155202 (2010).
 [3] R. Ishii, A. Kaneta, M. Funato, and Y. Kawakami, *Phys. Rev. B* (to be published).
 [4] Q. Yan and C. G. Van de Walle *et al.*, *Semicond. Sci. Technol.* **26**, 014037 (2011).

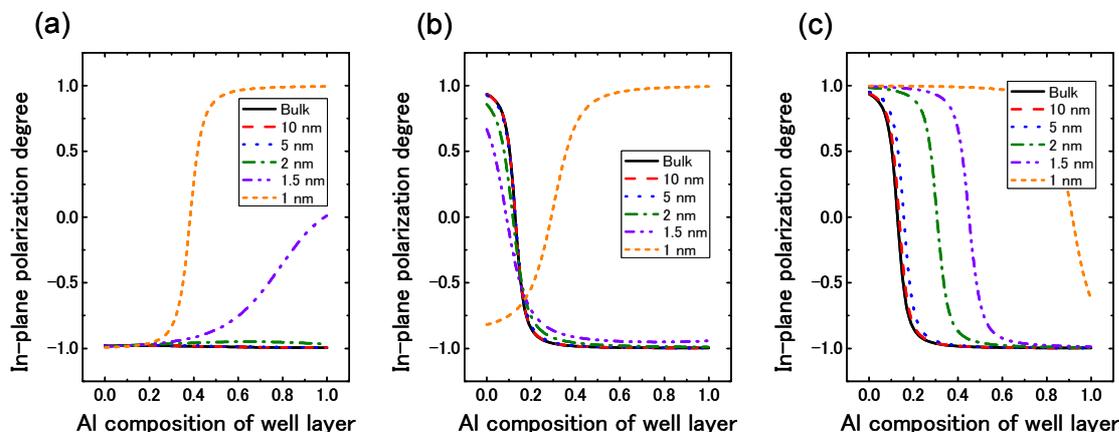


図 1: r 面 AlGaN/AlN 歪み量子井戸構造の面内偏光度. (a) 全て文献 [1] の物性定数, (b) 価電子帯パラメータ A_{1-6} は文献 [1], 他は文献 [2,3], (c) A_{1-6} は文献 [4], 他は文献 [2,3].