

圧電性半導体における弾性波伝搬・制御の分子動力学シミュレーション

Acoustic Wave on Piezoelectric Semiconductor Film via Molecular Dynamics Analysis

岡山大院自然 ○樋片 亮, 鶴田 健二, 薬師川 裕貴,

Okayama Univ., ○R.Hikata, K.Tsuruta, Y.Yakushigawa,

E-mail: tsuruta@okayama-u.ac.jp

近年、圧電材料界面における弾性波を用いてテラヘルツ波を発生できるという研究が報告されている[1]。これは、ナノスケールのパルス状弾性波をヘテロ構造の圧電性半導体界面へ入射することによって高周波の電圧分布を発生させ、そこからの電磁放射でテラヘルツ波が発生するという原理を用いている。しかし、検討されたナノスケールのヘテロ構造は実際の作製が容易ではなく、実用の観点からは困難が伴う。そこで、本研究では、単一の半導体のみで同様な効果を生み出す構造の提案を目指している。前回の報告[2]と同様、分子動力学法を用いた計算機シミュレーションにより単一の圧電性半導体である AlN ならびに GaAs の薄膜構造における弾性波伝搬特性、特に薄膜中に人工周期構造を導入した場合の弾性波制御法の確立を目指す。

弾性波を制御する構造として、フォトニック結晶のように周期的に空孔（キャビティ）を形成した構造に着目する。周期構造により、フォノン分散におけるバンドギャップ内の周波数が、AlN において 3THz, GaAs において 1.5THz 付近になるように格子間隔を見積もった。このようにして設計された周期構造をもとに、図 1, 2 に示す導波路を作成し、導波路中央で励振する弾性波伝搬の様子をシミュレートした。図 1 に AlN における表面と内部の伝搬、さらに導波路中央における膜厚方向の断面の伝搬、図 2 に GaAs における同様な伝搬のスナップショットを示す。バンドギャップ内の周波数で励振した場合、両材料ともに伝搬が導波路部分の膜内部に局在するのに対し、それ以外の周波数では逆に膜表面に局在する性質が観測された。これらの局在性は、表面と内部の伝搬モードの違いによるものと考えられ、表面弾性波を電磁波源として利用する場合、膜表面付近により強く局在するモードの選択が有効と考えられる。講演では、この効果を用いた表面分極の増大とテラヘルツ波発生の可能性についての検討を報告する。

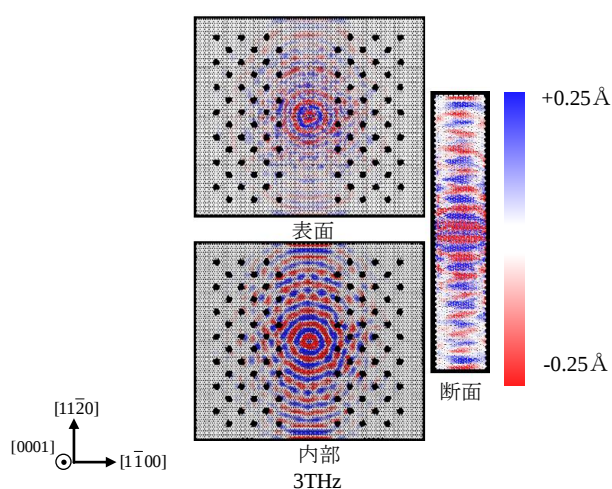


図 1 : AlN における弾性波伝搬

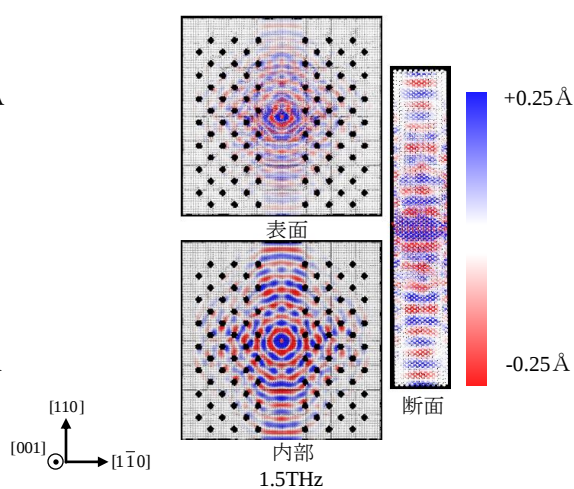


図 2 : GaAs における弾性波伝搬

[1] E. J. Reed et al., *Phys. Rev. Lett.* **101**, 014302(2008)

[2] 樋片, 鶴田: 第 74 回応用物理学会秋季学術講演会, 講演予稿集 17p-A2-4(2013)01-123.