

TR-O-0011

048

選択ドープ量子井戸のサブバンド構造と
サブバンド間吸収の解析

土屋 博

1989. 8. 31.

ATR光電波通信研究所

概要

近年、超薄膜結晶成長技術の進歩により、量子井戸構造が良質かつ再現性良く作製できるようになった。また、量子井戸構造に対する要求も多種・多様化してきている。このような状況において、選択ドーピングの手法は電子デバイス、発光デバイスにおいて欠くことのできない技術となってきている。本研究では選択ドーピング量子井戸構造におけるサブバンド構造をセルフコンシステントな計算によって求め、井戸内蓄積電子面密度にドーピング濃度による飽和特性があることを示した。また、この飽和領域における電子面密度のスペーサー層厚依存性を明かにした。続いて、これらの選択ドーピング量子井戸のサブバンド構造の計算結果より、サブバンド間吸収のスペクトルを求めるプログラムを作成し、その構造依存性を示した。障壁層ドーピング構造に比べ、井戸層ドーピング構造の方が振動子強度が強くなることを明らかにした。障壁層ドーピング構造ではドーピングを増加するに従い、吸収ピークエネルギーは低エネルギー側にシフトし、井戸層ドーピング構造では高エネルギー側にシフトすること、吸収強度はドーピングを増加するに従い、どちらの構造でも強くなることを示した。また、レーザー照射により吸収スペクトルが変化する実験に対する解析を行い、そのメカニズムについて考察を行った。

『選択ドーピング量子井戸のサブバンド構造とサブバンド間吸収の解析』

A T R 光電波通信研究所
土屋 博

目次

1. はじめに
2. サブバンド構造の解析
 2. 1 解析モデル
 2. 2 解析に用いた式
 2. 3 計算方法
3. 高濃度選択ドーピング量子井戸構造のサブバンド構造と電子面密度
 3. 1 計算結果の一例
 3. 2 ドーピング濃度と井戸内蓄積電子面密度
 3. 3 スペーサー層幅と井戸内蓄積電子面密度
4. サブバンド間吸収の理論的計算
5. サブバンド間吸収の計算結果と考察
 5. 1 振動子強度の構造依存性
 5. 2 吸収スペクトルのドーピング濃度依存性
 5. 3 外部光励起に対する一考察
6. まとめ

謝辞

参考文献

最近、分子線エピタキシャル法 (MBE)、有機金属気相成長法 (MOCVD) などの、超薄膜結晶成長技術の進歩により、量子井戸構造、あるいは超格子構造が、良質かつ再現性良く作製できるようになっている [1]。この、2種類の半導体を数10Å程度の厚さで交互に規則正しく積み重ねた量子井戸構造は、もとの半導体でない新しい物性を示すこと、またそれが応用面で非常に有用であることがわかっている。この量子井戸構造へ不純物をドーピングする方法としては、井戸層と障壁層の両方にドーピングする方法 (一様ドーピング) と、障壁層となる半導体のみ にドーピングする方法 (選択ドーピング) とが考えられる。それぞれのバンド図を図1.1に示す。ドーピングしていない場合井戸型だったポテンシャルは、ドーピングを行なう事により、電子を放出してイオン化したドナー不純物による正電荷と井戸内に蓄積した電子による負電荷によって、図に示すように湾曲してくる。この変化は選択ドーピングの場合に最も著しい。

選択ドーピングの場合、ドナー不純物と電子が空間的に分離されるため、不純物散乱やドーピングに伴う深い不純物準位の影響が減少し、非常に良質の電子系が得られる [2]。この様な構造を採用することによって、高速動作するHEMT (あるいはMDFET) などが、実現されている。一方、光学的特性を考えると、井戸層に電子が蓄積することと、選択ドーピングによって障壁層の非発光再結合中心から電子が空間的に分離されることが、量子井戸発光に影響を及ぼしていることが確認され、発光の高速化・高効率化の可能性が示されている [3]。また、高濃度選択ドーピング構造を採用することによって、半導体レーザの高速動作が実験的にも確認されている [4]。

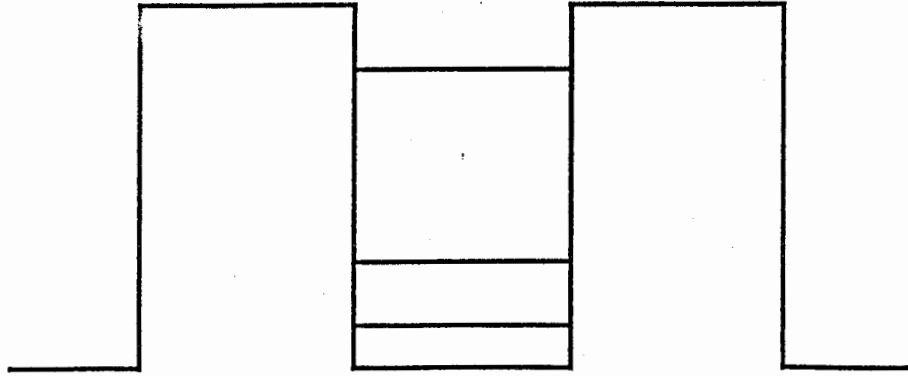
このように、選択ドーピングは電子デバイス、発光デバイスにとって非常に有用な手法になりつつある。この選択ドーピング量子井戸構造における電子状態、サブバンド構造を解析する手法は安藤らによって確立されている [5]。ただ、安藤らの計算は低濃度ドーピング領域 ($\sim 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) における解析であり、筆者らが扱っている高濃度ドーピング領域 ($> 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) では適応できない。本研究は、安藤らの手法を改良し、高濃度選択ドーピング量子井戸構造におけるサブバンド構造、電子密度等の構造依存性についてセルフコンシステントな計算によって調べた。とくに、井戸内蓄積電子面密度の飽和特性、スペーサー層幅依存性について示した。

また、近年量子井戸内に形成される量子準位間の遷移を利用したサブバンド間吸収 (図1.2参照) の研究が基礎面または応用面での興味から精力的に行なわれるようになって来た [6]。サブバンド間吸収とは基底準位にある電子が、基底準位と励起準位のエネルギー差に等しい波長の光を吸収して励起準位に遷移する現象である。このサブバンド間吸収の特長としては、時定数がバンド内のキャリア緩和に支配されるので速い [7, 8]、大きな非線形光学係数が予想される [9]、温度変化が少ない、吸収波長を量子井戸幅で設計できる、等があげられる。GaAs系の量子井戸を用いると、吸収波長は7~12 μm になり、主として赤

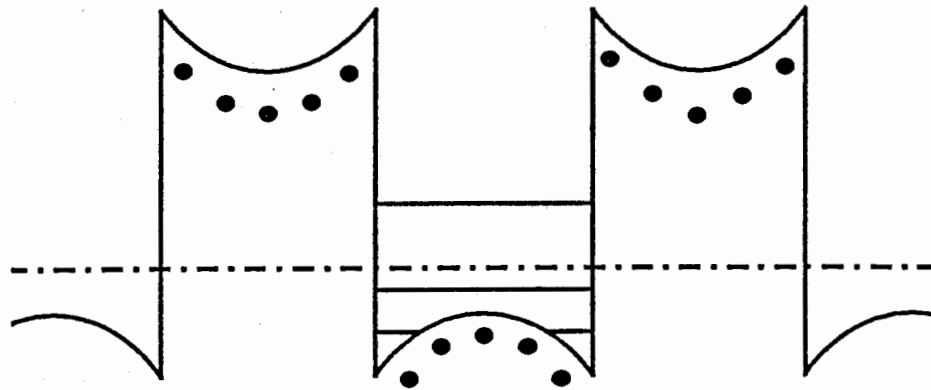
外域の光検出器 [10~12]、あるいは赤外域の光変調器 [13] 等を目指して研究が行われている。また、最近では量子井戸の基礎的物性を探るための一測定手段としてサブバンド間吸収が活用されるようになってきた [14]。このような状況下で、筆者らの研究室では、非線形光学係数の大きさ、その時定数の速さに着目し、サブバンド間吸収を利用した非線形デバイスを目指し、その基礎研究を行なっている [15, 16]。さらに、先の選択ドープ量子井戸構造のサブバンド構造を求める計算によって得られる量子準位、波動関数を基に、サブバンド間吸収スペクトルの解析も行っている。このような計算は、実際に吸収測定用試料を作製するときの指針になるばかりでなく、実験結果の理論的裏付けを行うときの手助けになると考える。本研究では、サブバンド間吸収スペクトルの解析を行い、その構造依存性、ドーピング濃度依存性について示し、試料作製における構造設計の指針を得た。また、外部光照射によるサブバンド間吸収スペクトル変化の実験に対する解析及び考察を行い、そのメカニズムを探った。

以下、第2章では、サブバンド構造解析に用いた式、計算方法について、第3章では計算結果をもとに井戸内蓄積電子面密度について考察を行った。第4章では、サブバンド間吸収の計算方法について述べ、第5章では計算結果、実験結果に対する考察等をおこなった。第6章では、それまでの計算結果を踏まえ、計算機解析の有用性、現時点での問題点等について述べたい。

ドーピングしていない場合



一様ドーピングの場合



選択ドーピングの場合

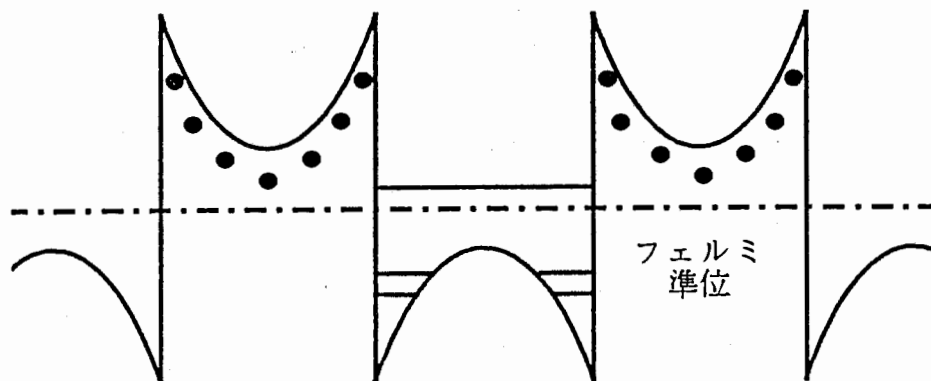
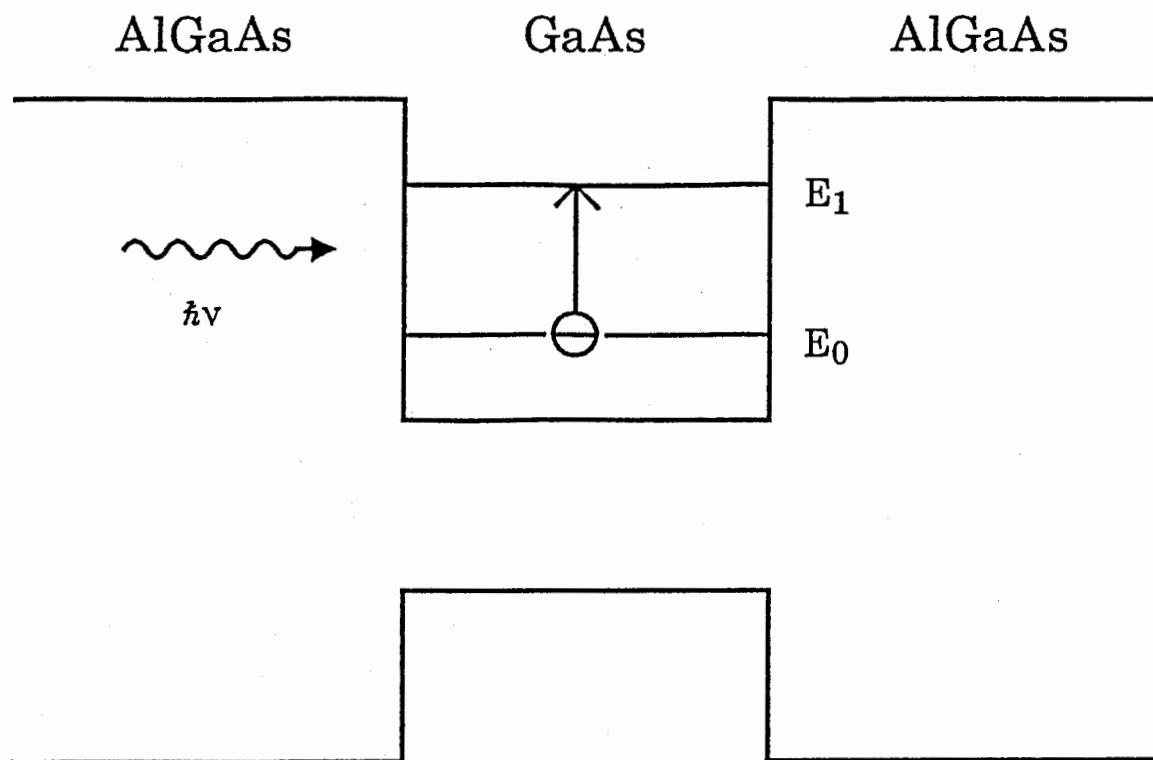


図 1.1

ドーピング方法とバンド構造



量子井戸のバンド内部での量子化準位間光学遷移

特 長

- 1) 時定数がバンド内のキャリア緩和に支配されるので速い
- 2) 大きな非線形光学係数が予想される
- 3) 温度変化が少ない
- 4) 吸収波長を量子井戸層厚で制御できる

図 1.2

サブバンド間吸収の模式図とその特長

§ 2 サブバンド構造の解析

§ 2.1 解析モデル

有効質量近似をもとにサブバンド構造の計算を行なう。ドーピングがなければ問題は基本的な Kronig-Penny モデルに帰着できる。ドーピングした量子井戸のサブバンド構造を計算により求めるためには、井戸型ポテンシャルの他に、電子分布とイオン化したドナーによる静電ポテンシャルを考慮しなければならない。

ここでは、静電ポテンシャルをハートレー近似の形で含んでいる。ハートレー近似とは、電子の平均の密度分布による静電ポテンシャルだけを考慮する近似である。このハートレー近似では電子間のクーロン斥力を過大評価してしまう。そこで、電子間の交換相関効果を密度汎関数法で取り入れている。スピンの同じ電子が同じ場所に存在できないというパウリの原理より、電子のエネルギーが下がる。これが交換効果である。さらに、スピンの異なる電子もクーロン斥力のために互いにはなれながら運動する。これにより、電子のエネルギーがさらに下がる。これを相関効果と呼ぶ。これを、相関効果と呼ぶ。この様な、交換効果や相関効果を多体効果と呼ぶ。

この様な効果を含め、波動関数と静電ポテンシャルをセルフコンシステントに求めている。

§ 2.2 解析に用いた式

前節で述べたように、選択ドープ量子井戸では量子井戸内のエネルギー準位を求めるために、井戸型ポテンシャルの他に電子の密度分布とイオン化したドナーによる静電ポテンシャルを考慮する必要がある。波動関数とポテンシャルをセルフコンシステントに求めるために、シュレディンガー方程式とポアソン方程式を連立させて数値的に解く。量子井戸に垂直な方向を z 軸にとると、シュレディンガー方程式とポアソン方程式は以下ようになる。

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_0(z) + V_p(z) + V_{xc}(z) \right) \xi_i(z) = E_i \xi_i(z) \quad (2.1)$$

$$\frac{d^2 V_p(z)}{dz^2} = -e \left(\sum_i N_i |\xi_i(z)|^2 - N_d^+(z) \right) \quad (2.2)$$

ここで $V_p(z)$ は静電ポテンシャル、 $V_0(z)$ はヘテロ障壁ポテンシャルでバンドオフセット ΔE_c にステップ関数を掛けた井戸型ポテンシャル、 $V_{xc}(z)$ は交換相関ポテンシャルである。 $\xi_i(z)$ は井戸層内 i 番目のサブバンドの電子

の波動関数、 E_i は*i*番目のサブバンドのエネルギー、 N_i は*i*番目のサブバンドの電子面密度、 $N_d^+(z)$ はイオン化したドナーの空間分布である。 m^* は電子の有効質量、 h はプランク定数、 e は素電荷である。なを、電子分布 $n(z)$ は

$$n(z) = \sum_i N_i \left| \xi_i(z) \right|^2 \quad (2.3)$$

で与えられる。サブバンドの電子面密度 N_i は、フェルミ準位を E_F とすると、絶対零度と有限温度でそれぞれ次式で表される。

$$N_i = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \Theta(E_F - E_i) \quad (\text{at } T=0K) \quad (2.4)$$

$$N_i = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) \right] \quad (\text{at } T > 0K) \quad (2.5)$$

ここで Θ はステップ関数、 k_B はボルツマン定数である。また、絶対零度においてはフェルミ準位以上のドナーは完全にイオン化、フェルミ準位以下のドナーはイオン化しないので、イオン化したドナー分布は、

$$N_d^+(z) = N_d \Theta(E_d(z) - E_F) \quad (2.6)$$

で表される。ここで $E_d(z)$ はドナーのエネルギー準位で位置の関数となる。有限温度ではドナー分布はフェルミ・ディラック分布で与えられ、

$$N_d^+(z) = N_d \left[1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp \left(\frac{E_d(z) - E_F}{k_B T} \right)} \right] \quad (2.7)$$

となる。式(2.1)と式(2.2)をセルフコンシステントに解くことによって井戸内に蓄積した電子分布、量子準位エネルギーなどを求めることが出来る。

交換相関ポテンシャルは、安藤らの論文[5]よりGunnarson and Lundqvistによる表式を使った。

$$V_{xc}[n(z)] = -\frac{2}{\pi \alpha r_s} \left[1 + 0.0545 r_s \ln \left(1 + \frac{11.4}{r_s} \right) \right] \frac{m^* e^4}{2 \kappa^2 \hbar^2} \quad (2.8)$$

ここで $\alpha = 0.521$ 、 κ は比誘電率である。また、 r_s は

$$n(z) = \left[\frac{4\pi}{3} (a_B^* r_s)^3 \right]^{-1} \quad (2.9)$$

で計算される。ここで、 a_B は有効ボア半径で、 $a_B = \kappa \hbar / m q^2$ となる。

§ 2.3 計算方法

ここでは、障壁層選択ドープ構造の絶対零度における計算方法について説明する。図 2.1 に計算に用いたモデルの一例を示す。 L_i はドーピングしている S_i がイオン化している領域の幅、 L_{ni} はイオン化していない領域の幅を表わす。ここで、 $L_b = 2(L_s + L_i + L_{ni})$ である。初期値として障壁高さ V_0 、井戸幅 L_w 、障壁層幅 L_b 、スペーサー幅 L_s 、ドーピング密度 N_d などを入力する。まず、ドナーが 100% イオン化していると仮定して、一様な正電荷分布で置き換えて、初期のポテンシャルを式 (2.2) で計算する。2 回目以降は、前回のイオン化したドナー分布 $N_d^+(z)$ と電子分布 $n(z)$ より求めたポテンシャルを初期値とする。これらのポテンシャルを基にハミルトニアンを算出し、シュレディンガー方程式 (2.1) を解く。ここで、電子の波動関数 ξ_i とエネルギー固有値 E_i が得られる。続いて、この波動関数を基に電荷中性条件よりフェルミエネルギー E_F を算出する。電荷中性条件は、イオン化したドナー分布 $N_d^+(z)$ と電子分布 $n(z)$ より、

$$\int_{-L/2}^{L/2} N_d^+(z) dz = \int_{-L/2}^{L/2} n(z) dz \quad (2.10)$$

となる。 $n(z)$ に式 (2.3)、さらに式 (2.4) を代入して、

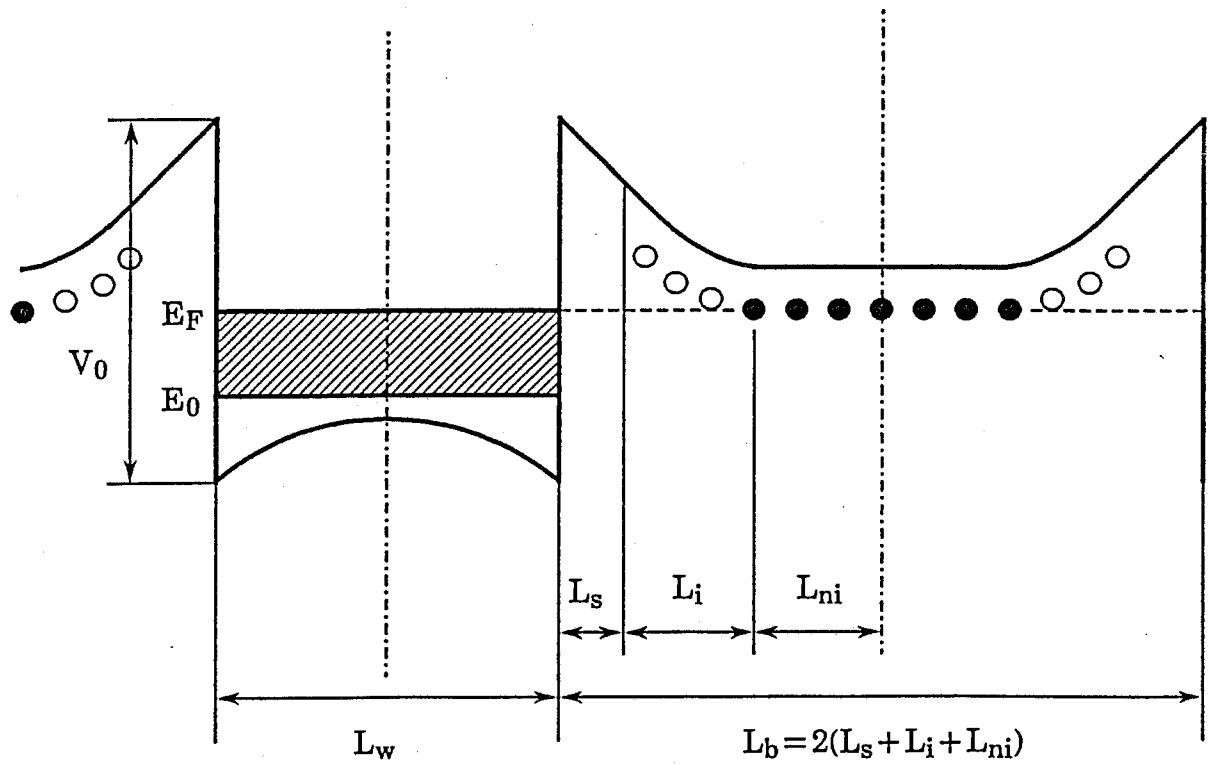
$$\begin{aligned} \int_{-L/2}^{L/2} n(z) dz &= \int_{-L/2}^{L/2} \sum_i N_i \left| \xi_i(z) \right|^2 dz \\ &= \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \sum_i \Theta(E_F - E_i) \end{aligned} \quad (2.11)$$

が得られる。ここでは、 $Nd^+(z)$ は変化させず、つまり左辺の値は一定として、 E_F のみを変化させる。井戸内の量子準位 E_i とフェルミ準位 E_F の関係より井戸内蓄積電子密度が得られるので、電子密度が左辺の値（イオン化しているドナー総数）に一致する様に E_F を求めるわけである。

次に、ここで求めた E_F と E_i 、 f_i を式 (2.3)、(2.4) に代入して $n(z)$ を求める。さらに、イオン化しているドナーの分布を式 (2.6) により求める。この式よりわかるように、 $E_d(z)$ が E_F より高エネルギーにあれば、100% イオン化、低エネルギーならまったくイオン化しないため、 $Nd^+(z)$ はステップ関数状になる。続けて、 $n(z)$ を基に交換相関ポテンシャル $V_{xc}(z)$ を式 (2.8) で計算する。そして、初めのポテンシャル計算に戻り再び計算を行なう。

この計算を、波動関数と静電ポテンシャルが自己無頓着になるまで繰り返す。前回の電子分布と今回の電子分布の差分がある値以下になったとき収束したと見なし計算を終了する。通常収束するまでに10数回かかる。

実際の計算では量子井戸構造が無限に繰り返されるとして、ポテンシャルをフーリエ級数に展開して行なう。フーリエ級数に展開して計算するメリットとしては、境界条件を特に考慮する必要が無いことがあげられる。フーリエ級数にて解を求めた後、量子井戸構造の半周期の領域で逆フーリエ変換して実空間に戻して解としている。このとき、井戸層と障壁層の界面におけるポテンシャルが0になるように条件を設定している。ただ、交換相関ポテンシャルは逆フーリエ変換して実空間に戻して計算を行ない、再びフーリエ変換して計算に取り込んでいる。



○ : イオン化しているSi

● : イオン化していないSi

▨ : 電子が詰まっている
電子面密度 N_s

図2.1 セルフコンシステントな計算に用いた高濃度選択ドーピング量子井戸モデル

§ 3 高濃度選択ドーピング量子井戸構造のサブバンド構造と電子面密度

§ 3. 1 バンドの曲がりの効果とドナー密度

図 3. 1 ~ 3. 3 に $L_w = 100 \text{ \AA}$ 、 $L_b = 500 \text{ \AA}$ 、 $L_s = 10 \text{ \AA}$ 、 $V_0 = 180 \text{ meV}$ と一定にして N_d を 0 、 1×10^{17} 、 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ と変化させたときの計算結果を示す。これらの図は、障壁層の中心点から隣の障壁層の中心点までの 1 周期の領域のポテンシャル、電子密度分布、エネルギー準位、およびフェルミ準位を示している。絶対零度の条件で計算を行なっている。障壁層に S_i をドーピングする事により、矩形だったポテンシャルが湾曲して来る。ドーピングを多くすると、フェルミ準位 E_F (1 点鎖線) は上昇し、バンドの曲がりが顕著になる様子がわかる。図 3. 2 ではドーピング量は低く、 $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ドーピングした S_i はすべてイオン化して、井戸内には $4.8 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ($= 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3} \times 480 \text{ \AA}$) の電子が蓄積している。しかし、ドーピングを増やすことにより、障壁層の伝導帯が下降すると同時に、井戸内の電子面密度が増加するためにフェルミ準位 E_F が上昇して来る。そして、ついにはフェルミ準位が障壁層内のドナー準位を横切るようになる。この様な状態になると、障壁層中のドナーは 100% イオン化するわけではなく、イオン化しない領域が出て来る。(絶対零度では、このように完全イオン化領域と非イオン化領域にわかれるが、有限温度ではドナー準位とフェルミ準位、および温度の関係でそれぞれの位置 z におけるイオン化率が決まる。)

図 3. 3 は非イオン化領域が現れるドーピング状態における計算結果を示す。このとき S_i を $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ドーピングしているが、井戸内には $1.8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ の電子しか蓄積していない (100% イオン化すれば $4.8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ の電子が蓄積する)。これはドーピングした S_i の約 $1/3$ しかイオン化していないことになる。つまり、空乏層がドーピング領域の $1/3$ に減少している。また、 S_i の束縛エネルギーとして 5 meV を仮定しているため、フェルミ準位と障壁層中央部の伝導帯がほぼ同じレベルになっているのがわかる。この様な状態からドーピング濃度を高くしても、井戸内に蓄積する電子面密度はドーピング濃度に依存しては増加しなくなる (この点については後ほど詳しく述べる)。また、選択ドーピングによって井戸内のポテンシャルが凸状になるため、井戸内の基底準位は高エネルギー側に押し上げられる。しかし、第一励起準位は基底準位ほどバンドの曲がりの影響を受けないため、基底準位と第一励起準位とのエネルギー差 E_{10} は、ドーピング濃度を高くすることにより減少する。この様な、ドーピング濃度と井戸内に蓄積される電子面密度との関係、エネルギー準位と井戸内蓄積面密度との関係について、次節で計算結果を基に議論する。また、ドーピングした S_i が 100% イオン化しない領域における電子面密度は障壁層内のスペーサー層の幅に大きく依存する。この点について、3. 3 節で詳しく述べる。

§ 3.2 ドーピング濃度と井戸内蓄積電子面密度

図 3.4 は各量子準位（実線）の井戸内蓄積電子面密度依存性の計算結果を示している。前節と同じく構造パラメータは、 $L_w = 100 \text{ \AA}$ 、 $L_b = 500 \text{ \AA}$ 、 $L_s = 10 \text{ \AA}$ 、 $V_0 = 180 \text{ meV}$ としている。また、フェルミ準位（破線）、および井戸と障壁層の中心点におけるポテンシャル（点線）の井戸内蓄積電子面密度依存性の計算結果も示す。図中斜線を引いているのは、各量子準位の幅を示している。 N_s が増加するのに従い E_F と井戸の中心点のポテンシャルは単調に増加し、障壁層の中心点のポテンシャルは単調に減少しているのがわかる。フェルミ準位は $N_s \sim 1.8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 付近で第 1 励起準位 E_1 まで達する。 N_s が $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ を越えるあたりで障壁層の中心点のポテンシャルがフェルミ準位と交差しそうになる。さらに N_s を増加させると、障壁層のポテンシャルの減少は止まり、逆に N_s と共に増加するようになる。この変極点を飽和点と呼ぶことにする。飽和点までは N_d に比例して N_s が増加するが、この値を越えると N_d に比例しては N_s は増加しなくなり、非イオン化領域が徐々に増加していくことになる。

井戸に束縛されたエネルギー準位 (E_0 , E_1) は、バンドの曲がりのため、 N_s の増加と共に上昇している。高エネルギー位置にある準位 ($E_2 \sim E_5$) は非局在状態に対応している。これらの非局在準位はバンドの曲がりにより、 N_s の増加に伴って下降している。これらの異なった 2 つの準位（束縛準位と非局在準位）はついには交差している。この時、これらの準位間の相互作用がみられる。つまり、サブバンドの幅が広がっているのがわかる。

図 3.5 に、図 3.4 と同じ条件のときの井戸内蓄積電子面密度 N_s のドーピング濃度 N_d 依存性の計算結果を示す。 N_s は $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ を越えるあたりまでは N_d に比例して増加しているが、 $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ を越えた付近より飽和傾向を示している。 N_s が N_d に比例して増加する領域を完全イオン化領域、飽和点を越え N_s が N_d に比例しない領域を飽和領域と呼ぶことにする。

ここで、飽和領域における電子の状態について考える。計算は絶対零度で行っているため、フェルミ準位より高いエネルギーには電子は存在できない。図 3.3 に見られるように障壁層には電子は蓄積していない。しかし、有限温度においては、下に凸になる障壁層に電子がかなり蓄積していると考えられる。この飽和点を越えるドーピングを行った場合においては、電子は井戸層だけに蓄積せず、障壁層にも蓄積するようになる。つまり、量子井戸構造における電子の井戸への閉じ込め効果という特徴が薄れてくる。この状態で電子を外部から注入しても、電子は井戸層に優先的に入ることはなく、井戸層、障壁層のどちらにも均一に入っていくようになる。このことより、出来るだけ飽和点を越えないように構造、及びドーピング密度を設計すべきである。

次に、他のパラメータを一定にして障壁層幅 L_b を 100 、 200 、 500 \AA と変化させたときの井戸内蓄積電子面密度 N_s のドーピング濃度 N_d 依存性を示す（図 3.6）。実線が $L_b = 100 \text{ \AA}$ 、点線が $L_b = 200 \text{ \AA}$ 、そして破線が $L_b = 500 \text{ \AA}$ の時の計算結果である。それぞれの結果に完全イオン化領域、飽和領域が

見られる。完全イオン化領域では N_s は L_b にほぼ比例している。飽和領域ではそのような傾向はなくなり、すべて飽和している領域では、 N_s は L_b に関係なく同一の値になっている。ここで、1つの井戸に電子を多く蓄積するという観点で考えると、 S_i が100%イオン化している領域では、障壁層幅が厚いほど、電子が多く蓄積することがわかる。しかし、飽和領域においてはその差はなくなり、障壁層幅に関係なく、同数の電子が蓄積する。つぎに、一定の領域幅に電子を蓄積することを考えると、障壁層幅が厚い構造では、井戸数が少なくなる（例えば、1200Åの量子井戸領域には、障壁層幅が500Åのとき井戸は2つ、200Åのとき井戸は4つ、100Åのとき井戸は6つとなる）。この様に考えると、完全イオン化領域では、電子総数は障壁層幅に関係なく一定になり、飽和領域においては、障壁層幅が狭いほど電子総数は多くなる。

§ 3.3 スペーサー層幅と井戸内蓄積電子面密度

ここで、飽和領域における井戸内蓄積電子面密度 N_s について考察する。飽和が起るドーピング状態では、 N_s はスペーサー幅 L_s に大きく左右される。この飽和領域における、 N_s の L_s 依存性の計算結果を図3.7に示す。この図より、スペーサー幅が薄いほど井戸内に電子は多く蓄積し、スペーサー層幅が厚いほど電子は蓄積しなくなる。これは、井戸層と障壁層の界面に続いて存在するスペーサー領域における電圧降下が大きく寄与していると考えられる。つまり、スペーサー幅が広いと、このスペーサー領域におけるポテンシャルの降下が大きくなり、結果的に障壁層の湾曲が大きくなる。そのため飽和点がより低濃度領域側にシフトするわけである。

HEMTなどの選択ドープを利用した電子デバイスでは、このスペーサー層の幅によって電子（またはホール）の移動度が大きく影響を受けることは一般によく知られている[2]（スペーサー層幅をある程度大きくしないと、不純物散乱の影響を受け、移動度が高くない）。一方、発光特性とスペーサー層の幅の関係についての報告例はあまりない。そこで、スペーサー層の幅を変化させた時の発光特性を測定した。 $L_w=100\text{Å}$ 、 $L_b=500\text{Å}$ 、 $N_d=1 \times 10^{19}\text{cm}^{-3}$ 、Alの組成比 $x \sim 0.35$ と一定にして、 L_s を0, 20, 40, 100Åと変化させた時の、量子井戸からの発光強度の実験結果を図3.8に示す。この図より、 L_s を大きくするほど、発光強度が強くなっていることが分かる。発光特性においても、電子デバイスにおける移動度と同様に、障壁層中の不純物が大きく関与しているといえる。ここで、先の計算結果と合わせて考えると、発光強度を稼ぐには、スペーサー層幅を大きくとる方が良いが、電子を多く蓄積するためには、スペーサー層幅を小さくした方がよいという相反する結果が得られる。ただし、この計算及び実験結果はドーピング濃度がかなり高い領域（飽和領域）における結果であり、低濃度領域では適応できない。

Graphic Plot of Subband Structure

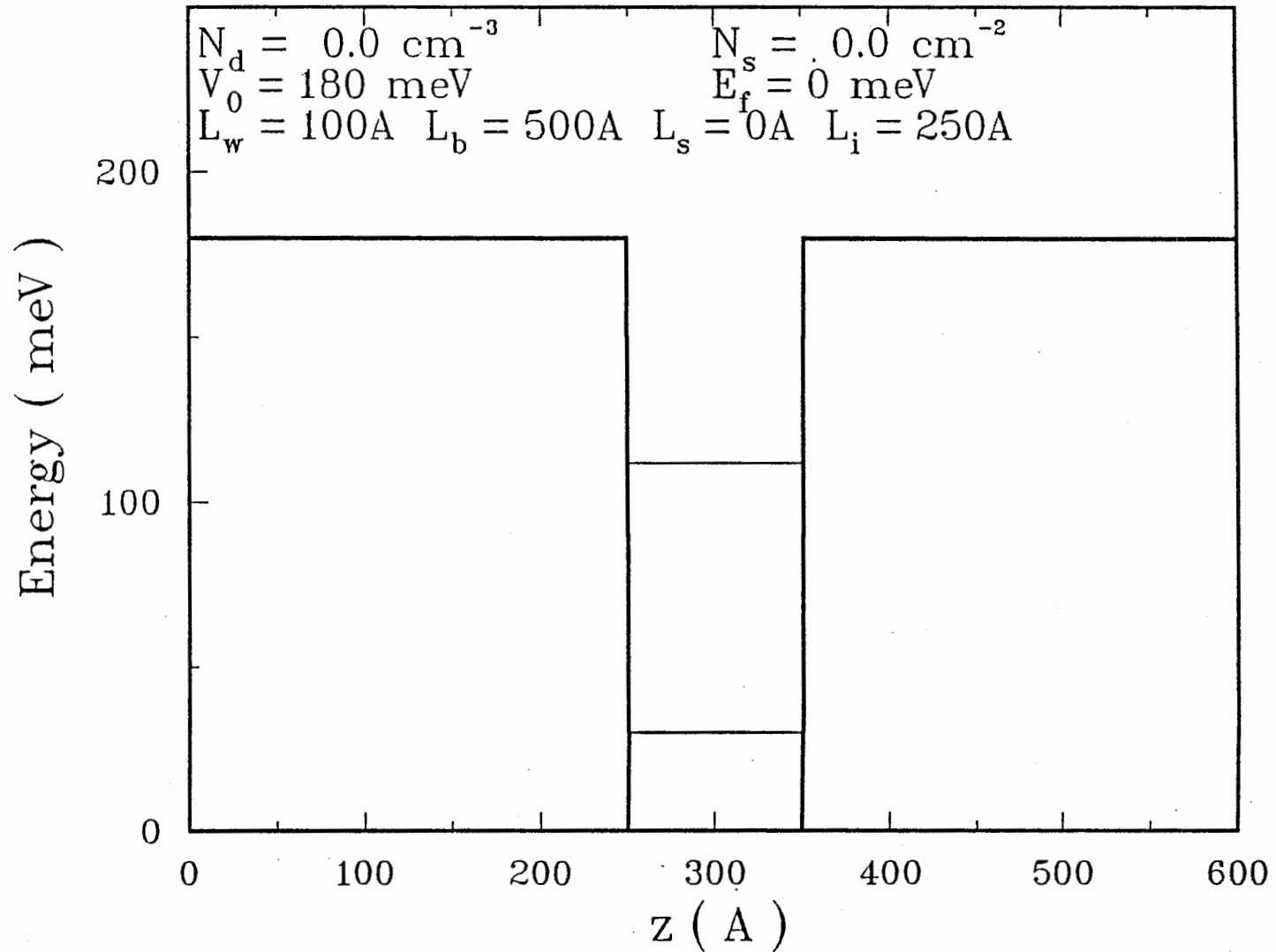
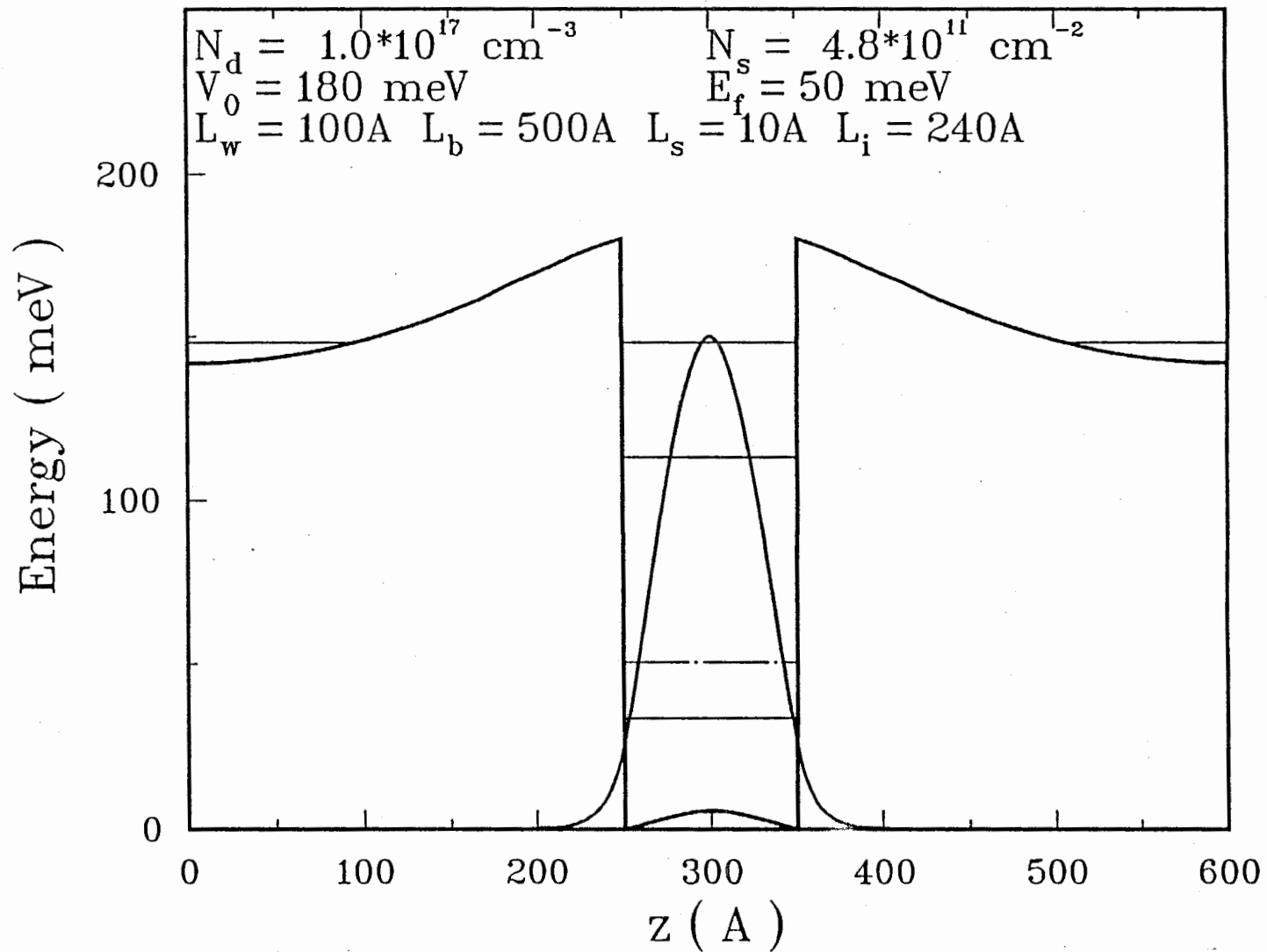


図 3.1

$N_d = 0$ の時のバンド構造の計算結果

Graphic Plot of Subband Structure and Electron Distributions



3.2 $N_d = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ の時のバンド構造の計算結果

Graphic Plot of Subband Structure and Electron Distributions

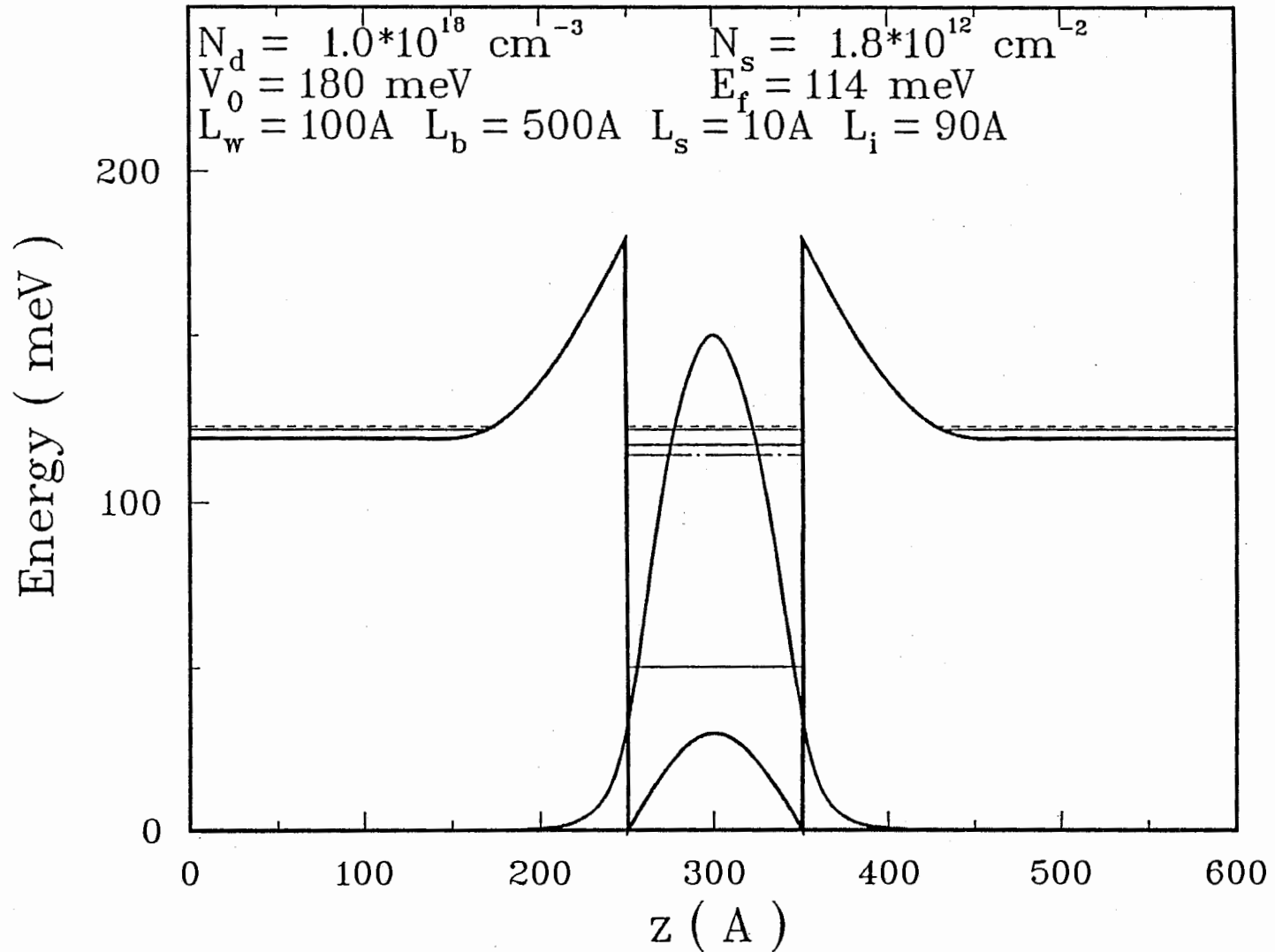
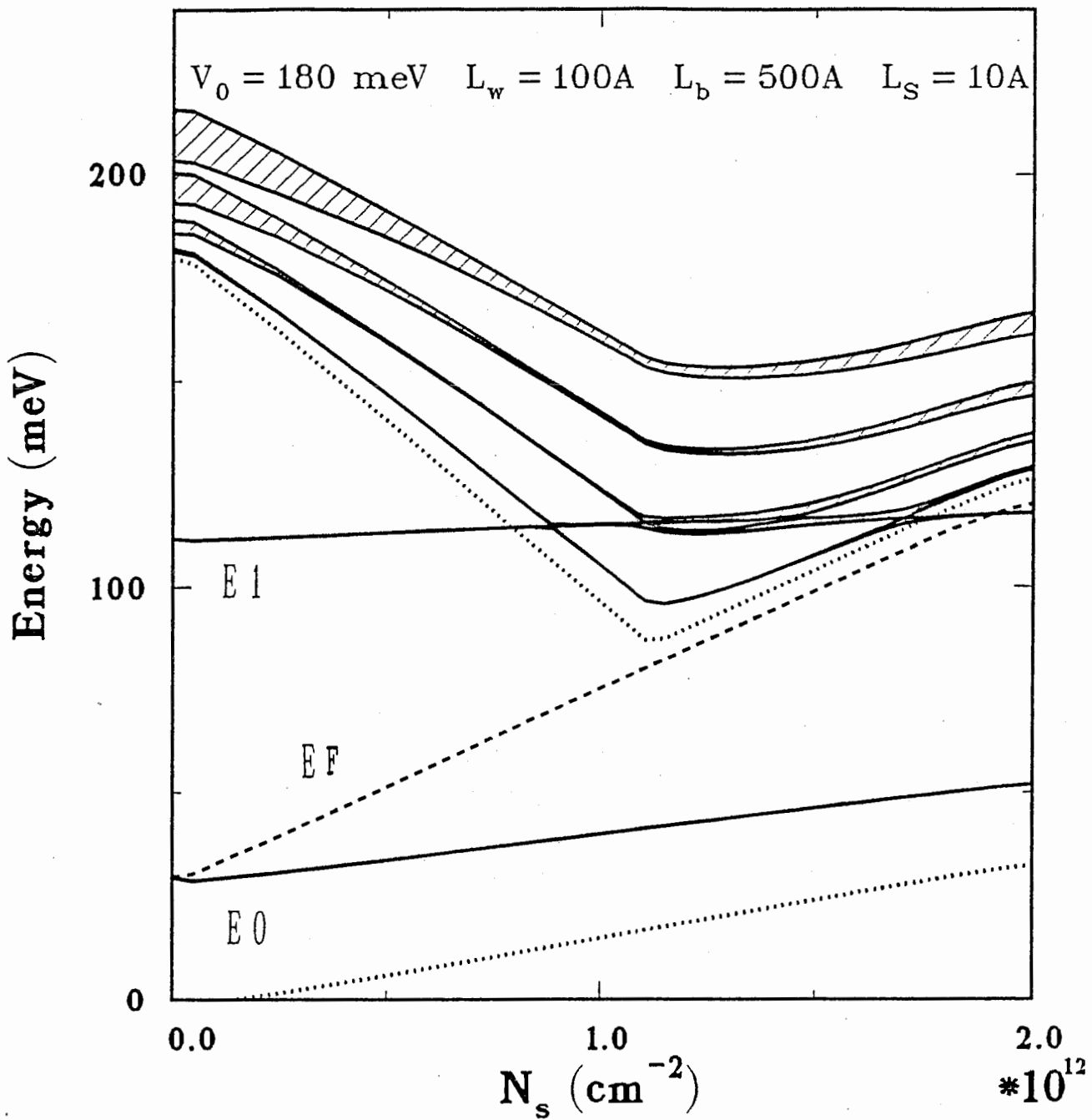


図 3.3 $N_d = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ の時のバンド構造の計算結果

Graphic Plot of Energy Spectra



3.4 各エネルギー準位の電子面密度依存性

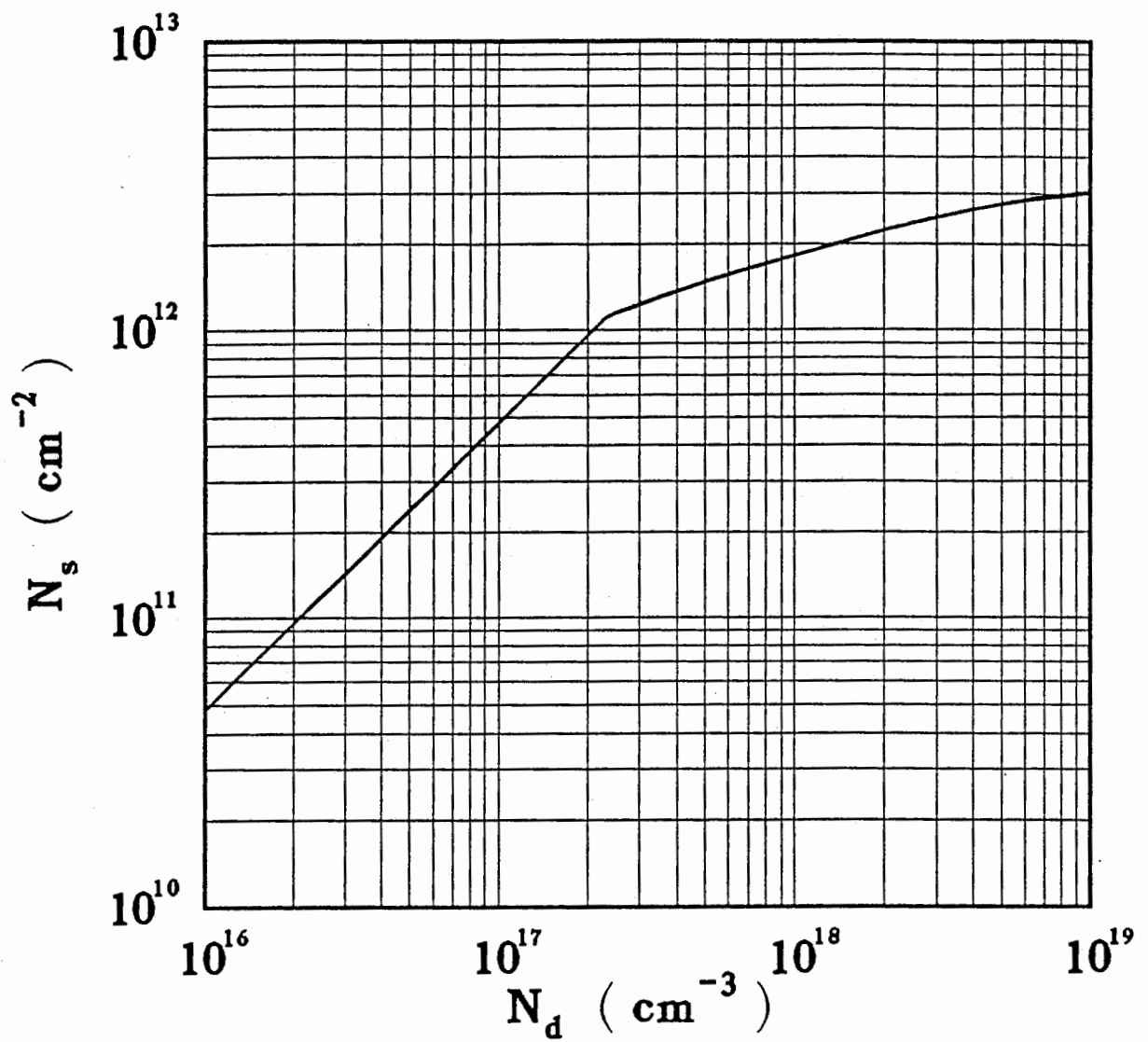


図 3.5 電子面密度のドーピング濃度依存性

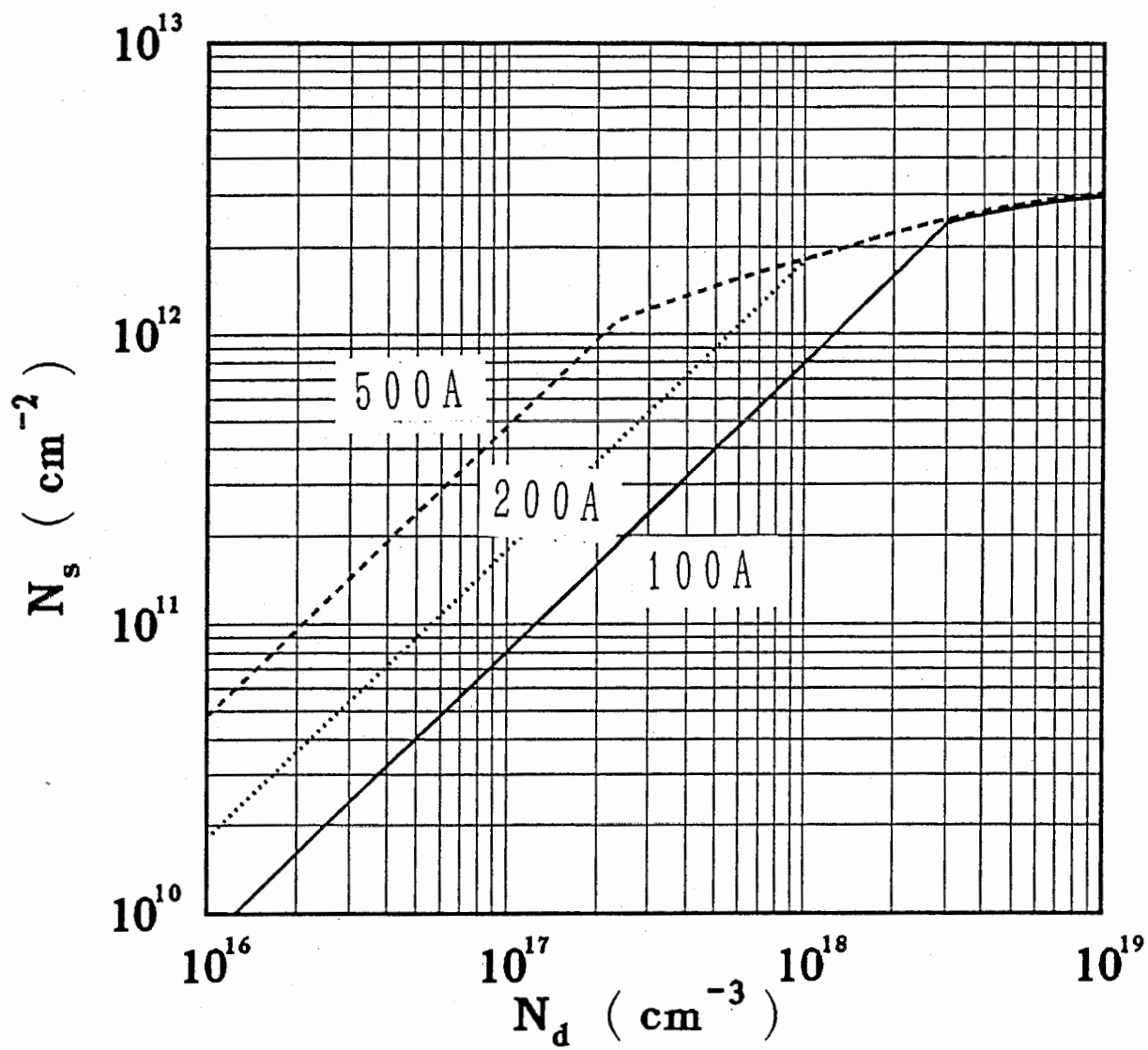


図 3.6 障壁層幅を変化させたときの電子面密度

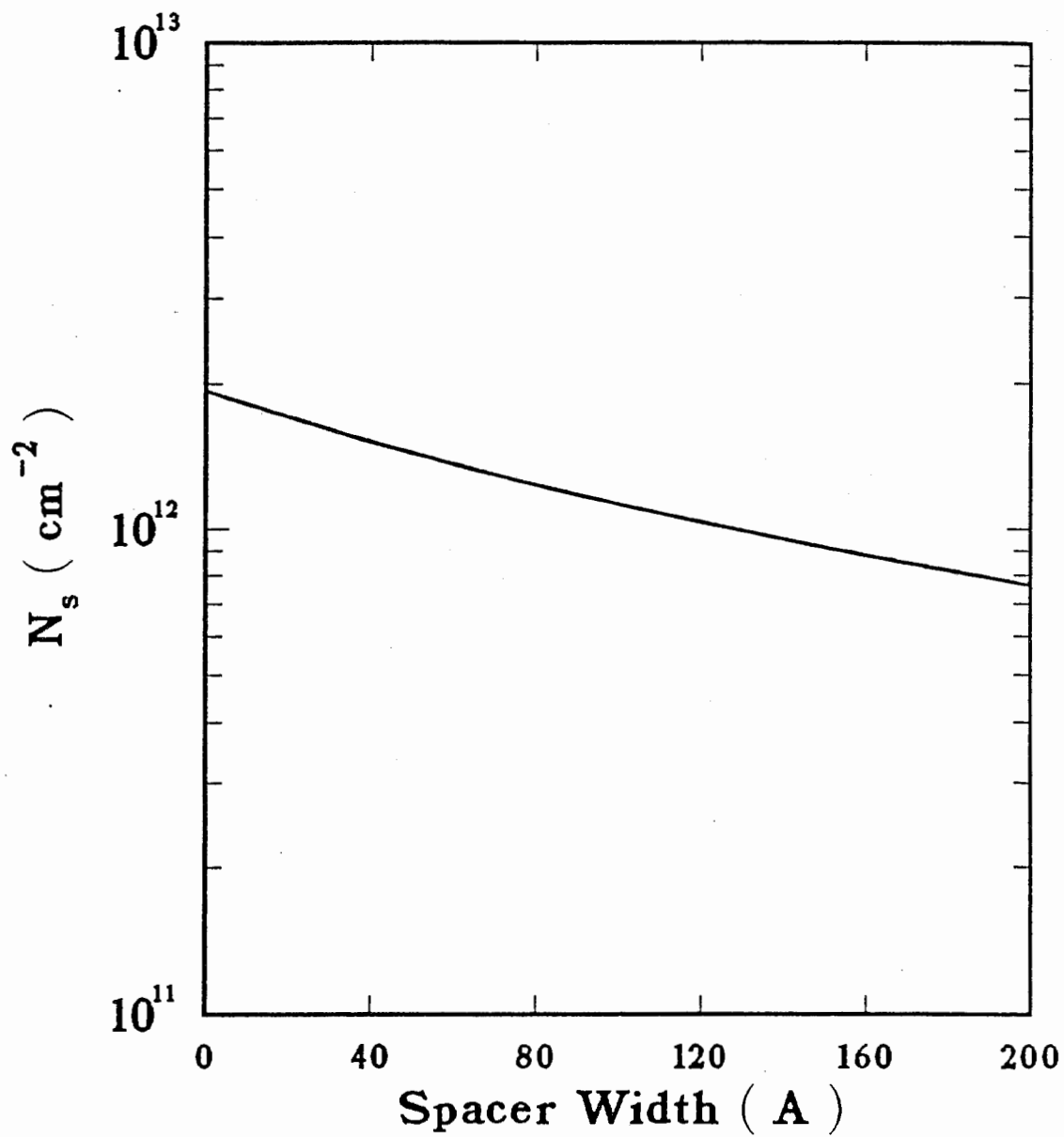


図 3.7 電子面密度とスペーサー層幅

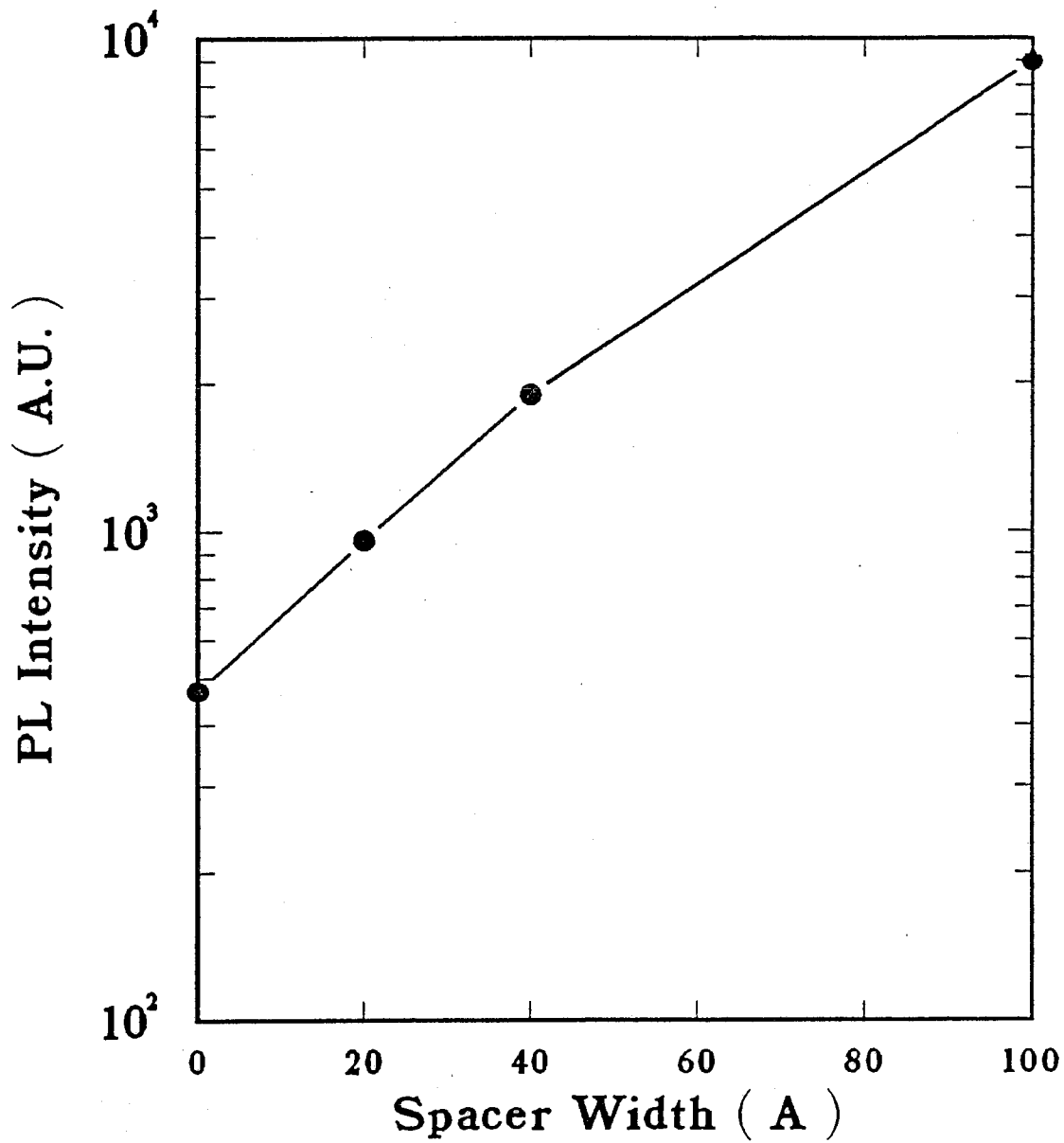


図 3. 8

量子井戸からの発光強度のスペーサー層幅依存性 (実験結果)

§ 4 選択ドープ量子井戸構造におけるサブバンド間吸収

ここでは、先の選択ドープ量子井戸構造のサブバンド構造を求めるプログラムによって得られる量子準位、波動関数を基にして、サブバンド間吸収スペクトルを計算する方法について述べる。

まず、各準位の波動関数よりマトリックスエレメント M_{fi} を次式により求める。

$$M_{fi} = \frac{m^*(E_i - E_f)}{i\hbar} \int_{-L/2}^{L/2} \xi_f^*(z) z \xi_i(z) dz \quad (4.1)$$

ここで、 E_i は初状態、 E_f は終状態の量子準位のエネルギーを表す。 L は量子井戸の一周期の長さで、 $L = L_w + L_b$ である。また、井戸の中心を原点としている。このマトリックスエレメントをもとに、スペクトル形状をローレンツ関数で近似すると、吸収係数 α を次式により求めることができる。

$$\alpha = \sum_i \sum_f \frac{\mu c m^* k_B T e^2}{\pi \hbar^2 m^{*2} L \kappa \omega} |M_{if}|^2 \ln \left[\frac{1 + \exp\left(\frac{E_F - E_i}{k_B T}\right)}{1 + \exp\left(\frac{E_F - E_f}{k_B T}\right)} \right] \frac{(\Gamma/2)}{(\hbar\omega - E_{fi})^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (4.2)$$

ここで、 $E_{fi} = E_f - E_i$ 、 μ は透磁率、 c は真空中の光の速度、 T は温度、 ω は波数、そして Γ は線幅である。

また、マトリックスエレメントより振動子強度 f は次式で与えられる。

$$f = \frac{2|M_{fi}|^2}{m^*(E_f - E_i)} \quad (4.3)$$

ここに用いた計算式はすべて D. Ahn and S. L. Chuang の論文 [17] より引用した。彼らは計算の基になるモデルとして、無限大の障壁を持ったアンドープの量子井戸を仮定している。しかし、実際にサブバンド間吸収を行うには、井戸内の基底準位に電子が存在しなければならない。そのため、選択ドープ量子井戸構造が用いられている（アンドープ量子井戸構造に Ar イオンレーザを照射し、そのレーザ励起によって発生した電子によるサブバンド間吸収を観測したという報告もある [18]）。つまり、選択ドープ構造のサブバンド構造の計算結果を基に吸収スペクトルの計算を行えば、より正確な解析ができると考える。

先のサブバンド構造の解析では、井戸層における発光再結合に着目していたため、発光層に非発光再結合中心を導入する井戸層ドープ構造は考慮していなかつ

た。しかし、サブバンド間吸収においては伝導帯中の基底準位にある電子が、赤外入射光を吸収して励起状態に上がり、さらにはその電子が光、又は熱を放出して基底状態に戻る過程に着目しているため、そのドーピングによってもたらされる、非発光中心の影響は無視してよいと考える。そこで、ここでは井戸層ドーブ構造についても解析を行っている。井戸層ドーブ構造は障壁層ドーブと湾曲の方向が違う。図4.1、図4.2に障壁層ドーブ、および井戸層ドーブ構造におけるバンド構造の計算結果の一例を示す。共に $L_w = L_b = 100 \text{ \AA}$ 、 $L_s = 10 \text{ \AA}$ 、 $V_0 = 180 \text{ meV}$ 、 $N_d = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ の条件で計算している。図から分かるように、井戸層ドーブ構造では、井戸層の伝導帯は下に凸になり、障壁層の伝導帯は上に凸になる。この湾曲の方向は井戸に電子がたまり易い方向であり、サブバンド間吸収の実験を行うには好都合である。井戸層にドーブする構造を解析するに当たり、一つの問題点は、井戸内のドナー準位が常にフェルミ準位以下になり、障壁層ドーブ構造における解析時の計算式を用いると、高濃度域まで計算できないことである。また、井戸層に高濃度ドーブした時の S_i の束縛エネルギーがどうなるかもはっきり分かっていない。そこで、井戸層ドーブ構造を解析するときは、ドーピングした S_i が100%イオン化していると仮定して計算を行った。そのほかの条件は障壁層ドーブと同一である。また、サブバンド間吸収の解析は計算式に温度 T が入っているため、解析は常に有限温度で行った。

Graphic Plot of Subband Structure and Electron Distributions

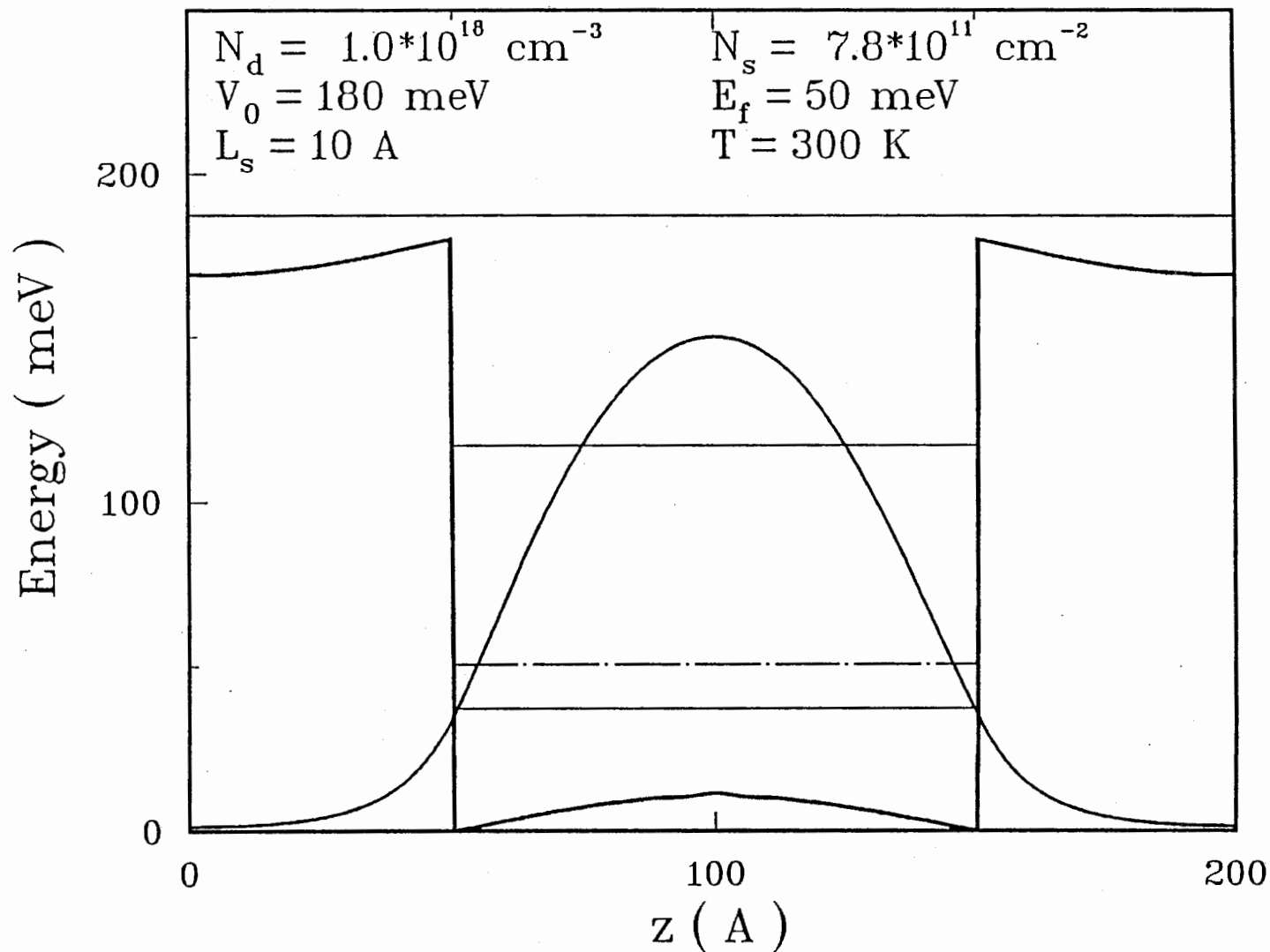


図 4. 1

障壁層ドーピングのバンド構造

Graphic Plot of Subband Structure and Electron Distributions

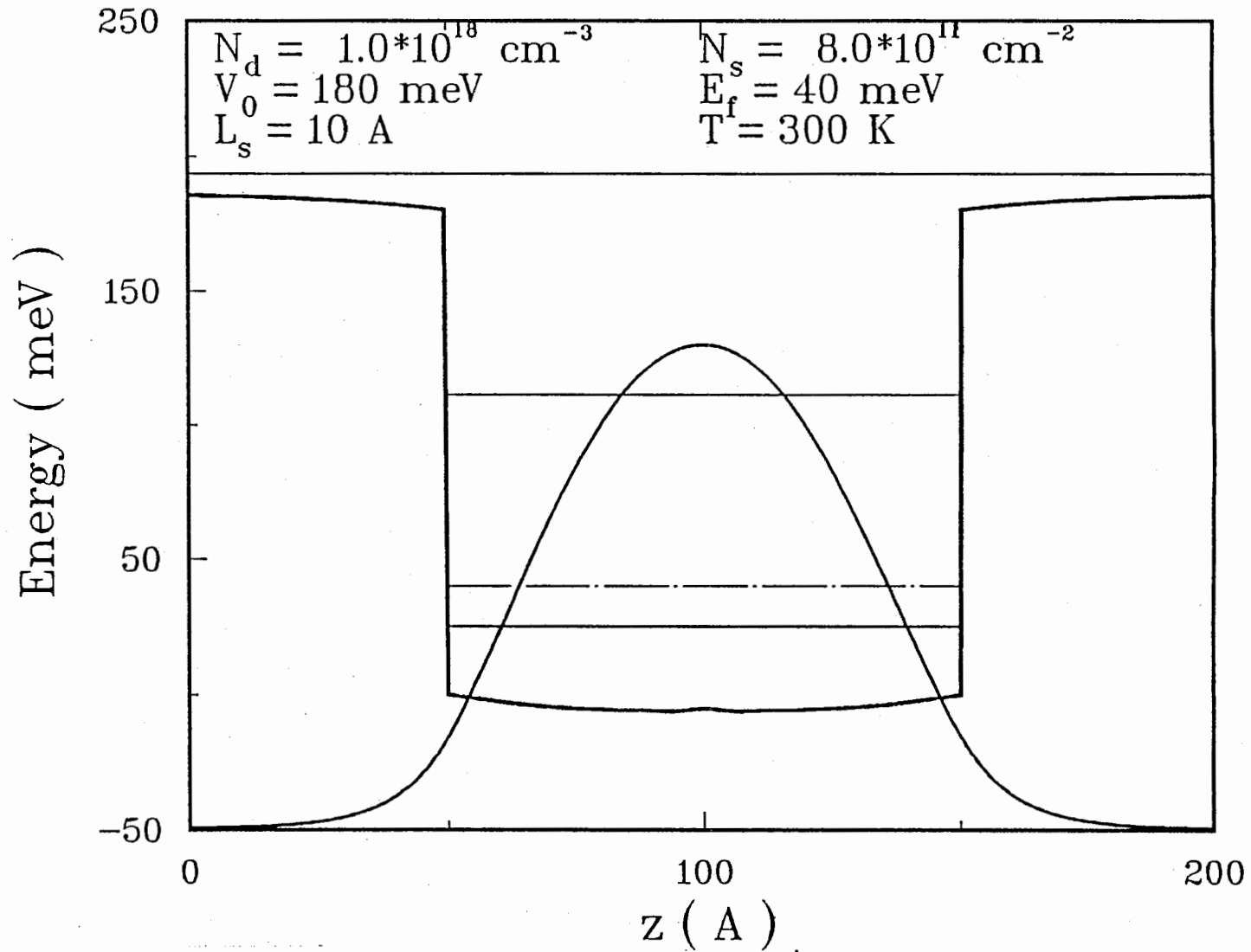


図 4. 2

井戸層ドーピングのバンド構造

§ 5 サブバンド間吸収の計算結果と考察

§ 5.1 振動子強度の構造依存性

振動子強度は、電子と光（振動電磁場）との相互作用の大きさを表すパラメータである。つまり、振動子強度が大きいほど、光吸収、または発光の強度が大きくなることを意味する。初めに、式（4.3）で振動子強度を求め、その構造依存性を調べた。

振動子強度の障壁層高さ、および井戸幅依存性の計算結果を図5.1に示す。障壁層幅は150 Åとした。井戸幅は50 Å（実線）、60 Å（点線）、70 Å（破線）、90 Å（一点鎖線）である。障壁高さが低くなるにつれ、振動子強度が減少しているのがわかる。これは、障壁高さが低くなると励起準位の電子の閉じ込めが弱くなり、波動関数のしみだしが大きくなって振動子強度が減少するためと考えられる。また、障壁が低い構造では井戸幅が狭くなるほど、振動子強度が減少している。これは井戸幅が狭くなると、井戸内の量子準位が高エネルギー側に押し上げられ、励起準位の波動関数のしみだしが大きくなり、励起準位における電子の閉じ込め（局在化）が薄れるためと考えられる。

続いて、振動子強度のドーピング濃度依存性を井戸層ドーピング構造と障壁層ドーピング構造で計算した。図5.2がその結果で、実線が障壁層ドーピングの結果を示している。L_w=50 Å、L_b=150 Å、L_s=10 Å、V₀=350 meV、T=300 °Cである。障壁層ドーピング構造では、ドーピング濃度を高くするにつれて振動子強度が減少している。これは、障壁層ドーピング構造ではドーピングすることによって障壁層のポテンシャルが下に凸になり、結果的に井戸内励起準位の波動関数のしみだしが大きくなるためと考えられる。これとは逆に井戸層ドーピング構造では、ドーピング濃度を高くするに従い、振動子強度が大きくなっている。これは、井戸層ドーピングにより障壁層のポテンシャルが上に凸になり、等価的に障壁層が高くなるためである。この結果よりサブバンド間吸収を行なうには、障壁層ドーピング構造より井戸層ドーピング構造の方が望ましいことがわかる。

§ 5.2 吸収スペクトルのドーピング濃度依存性

井戸層ドーピング構造と障壁層ドーピング構造における吸収スペクトルの変化を図5.3、図5.4に示す。また、この時の吸収ピークエネルギーの変化を図5.5に示す（実線が障壁層ドーピング、点線が井戸層ドーピング）。構造パラメータはL_w=52 Å、L_b=150 Å、V₀=283 meV、T=300 °C、L_sは障壁層ドーピング40 Å、井戸層ドーピング10 Åである。N_dを 1×10^{17} 、 1×10^{18} 、 $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ と変化させている。障壁層ドーピング構造では、サブバンド構造の計算結果にも見られるように、ドーピング濃度を高くするに従い、吸収のピークエネルギーは低エネルギー側にシフトする。逆に、井戸層ドーピング構造では、吸収のピークエネルギーは高エネルギー側にシフトする。このピークエネルギーのシフトはキャリアの静電

ポテンシャルによるバンドの曲がりが大きく影響している。つまり、障壁層ドープでは井戸層の伝導帯は、バンドの曲がりによって上に凸になり、基底準位は高エネルギー側に押し上げられる。しかし、励起準位は基底準位ほどバンドの曲がりの影響を受けないため、エネルギー差 E_{10} は減少する。井戸層ドープでは、逆に井戸層内の伝導帯が下に凸になるため、基底準位は低エネルギー側にシフトし、励起準位は基底準位ほどシフトしないためエネルギー差 E_{10} は増加する。また、吸収係数の最大値は共に増加している。これより、吸収強度を大きくするためには、キャリアをできるだけ多く井戸内に蓄積すれば良いことが分かる。

§ 5.3 外部光励起に対する一考察 [19]

筆者らの研究室では、サブバンド間の吸収を利用した赤外域の光スイッチ、または光変調器を目指して、外部光による赤外光の吸収変化の実験を行っている。これは、井戸層ドープ量子井戸試料に対し、外部光（ここでは Ar イオンレーザ）を照射し、サブバンド間吸収スペクトルの変化を観測している。この実験に関する詳しい報告は別の機会に譲るとして、ここでは簡単に実験結果とそれに関する計算機解析の結果、および考察について述べる。

図 5.6 に Ar イオンレーザを照射したときの吸収スペクトルの変化の実験結果を示す。試料構造は、井戸層ドープ構造の、 $L_w = 52 \text{ \AA}$ 、 $L_b = 150 \text{ \AA}$ 、 $L_s = 10 \text{ \AA}$ 、障壁層の Al の組成比 $x = 0.35$ 、ドーピング Si 濃度は $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ である。ホール測定より井戸内蓄積電子面密度は $3.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ である。実線がレーザを照射しないときの吸収スペクトル、それぞれ 83 (点線)、166 (破線)、248 W/cm^2 (一点鎖線) のレーザパワーを照射したときのスペクトルである。吸収測定は室温で行っている。Ar イオンレーザを照射することによって吸収のピークは低エネルギー側にシフトし、最大吸収度は減少する。

この変化の原因として、2つ考えられる。1つは、Ar イオンレーザ照射によって発生する熱、もう1つは自由キャリアの発生である。まず、キャリアの発生について計算機解析の結果を基に考察した。ここで問題となるのは、Ar イオンレーザ照射の効果を解析にいかに取り込むかである。実際に2つのモデルを考案し、解析を行った。レーザ照射によって電子・正孔対が発生するため、電荷的には中性条件を満足している。そこで、レーザ照射の効果をドープ量を増加させることと等価と考えた。これが、モデル1である。もう1つは、レーザ照射の効果を電子数のみの増加として取り込むモデルである。これを、モデル2とした。この2つのモデルで計算を行った。それぞれのモデルでの計算結果を図 5.7 に示す。実線のスペクトルはレーザを照射しないときの吸収スペクトル、点線がモデル1に対する結果、破線がモデル2に対する結果を示す。共に、電子の増加量として $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ を仮定している。井戸層ドープ構造であるので、モデル1では吸収ピークは高エネルギー側にシフトしている。これは、吸収スペクトルのドーピング濃度依存性の結果と同一である。逆に、モデル2ではピークは低エネルギー側にシフトしている。これは、電子を増加させることにより、電子の負電荷に

より井戸内の伝導帯が持ち上げられ、バンドの曲がり小さくなったためである。なお、吸収の最大値はモデル1、2共に増加している。計算結果と実験結果を比較すると、吸収ピークエネルギーの変化の方向は、モデル2と実験結果は一致する。しかし、最大値の変化に関してはどちらのモデルも実験結果と一致しない。また、 248 W/cm^2 のレーザーパワー照射によって発生するキャリア数を見積ると $6.4 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ となる。この値は、ドーピングによって発生するキャリア数に比べ、あまりに少なく(約50分の1)、実験における吸収スペクトルの変化を引き起こすとは、考えにくい。

以上の計算結果及び考察より、レーザー照射によるサブバンド間吸収スペクトルの変化はキャリアの効果が支配的ではなく、レーザー照射による温度上昇の効果が大きく寄与していると考えられる。

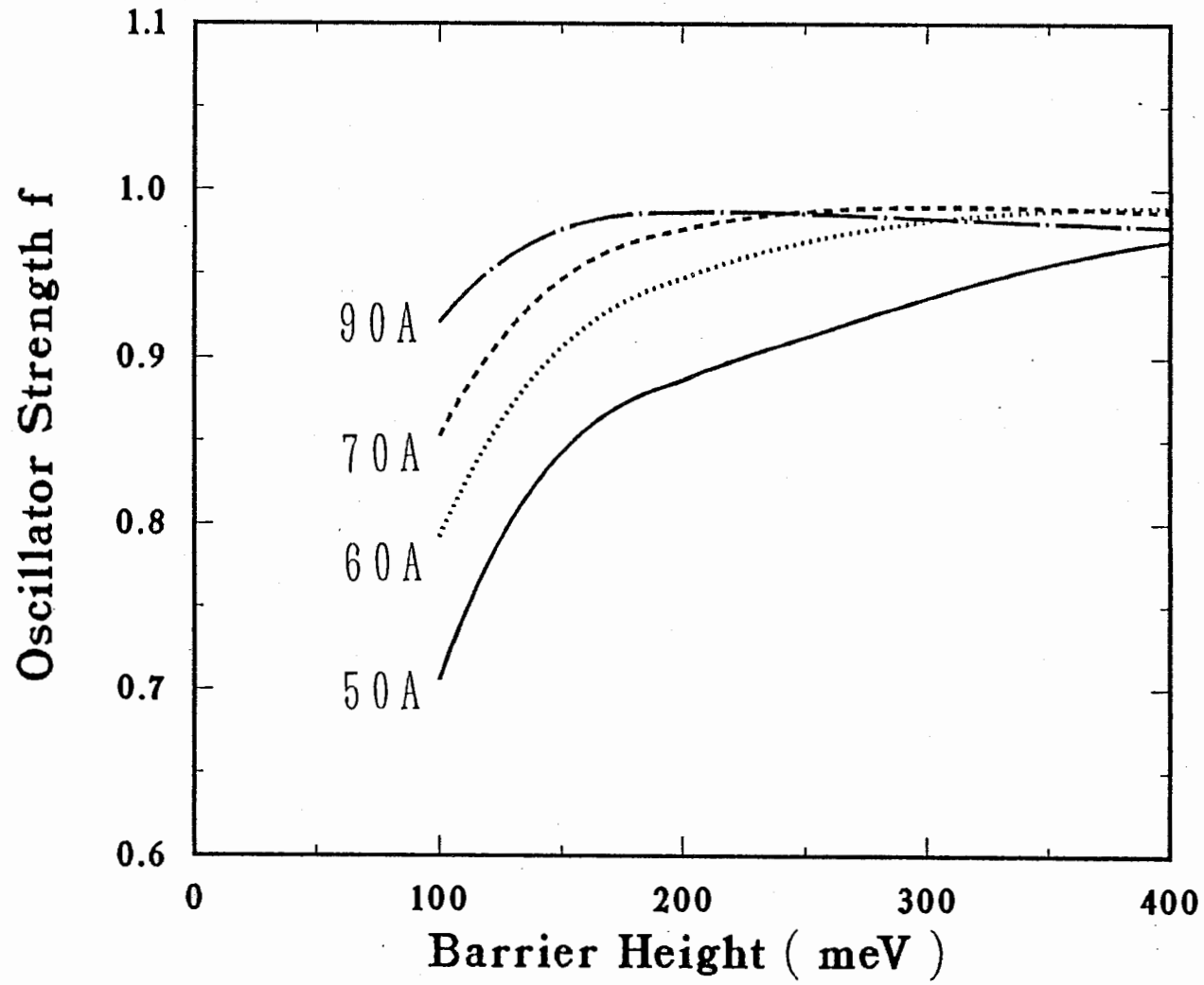


図 5.1 振動子強度の井戸幅・障壁高さ依存性

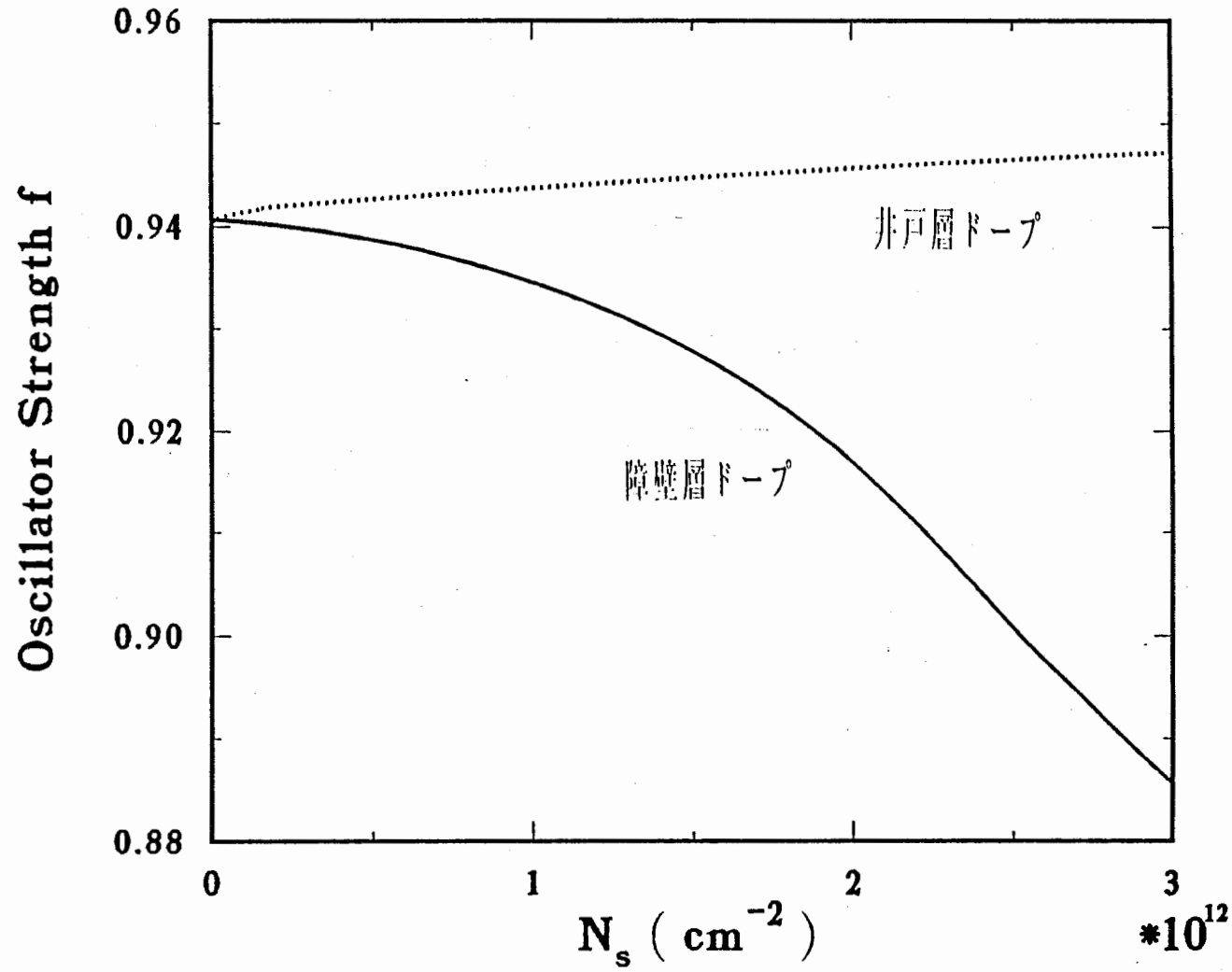


図 5.2 振動子強度の電子面密度依存性とドーピング構造による違い

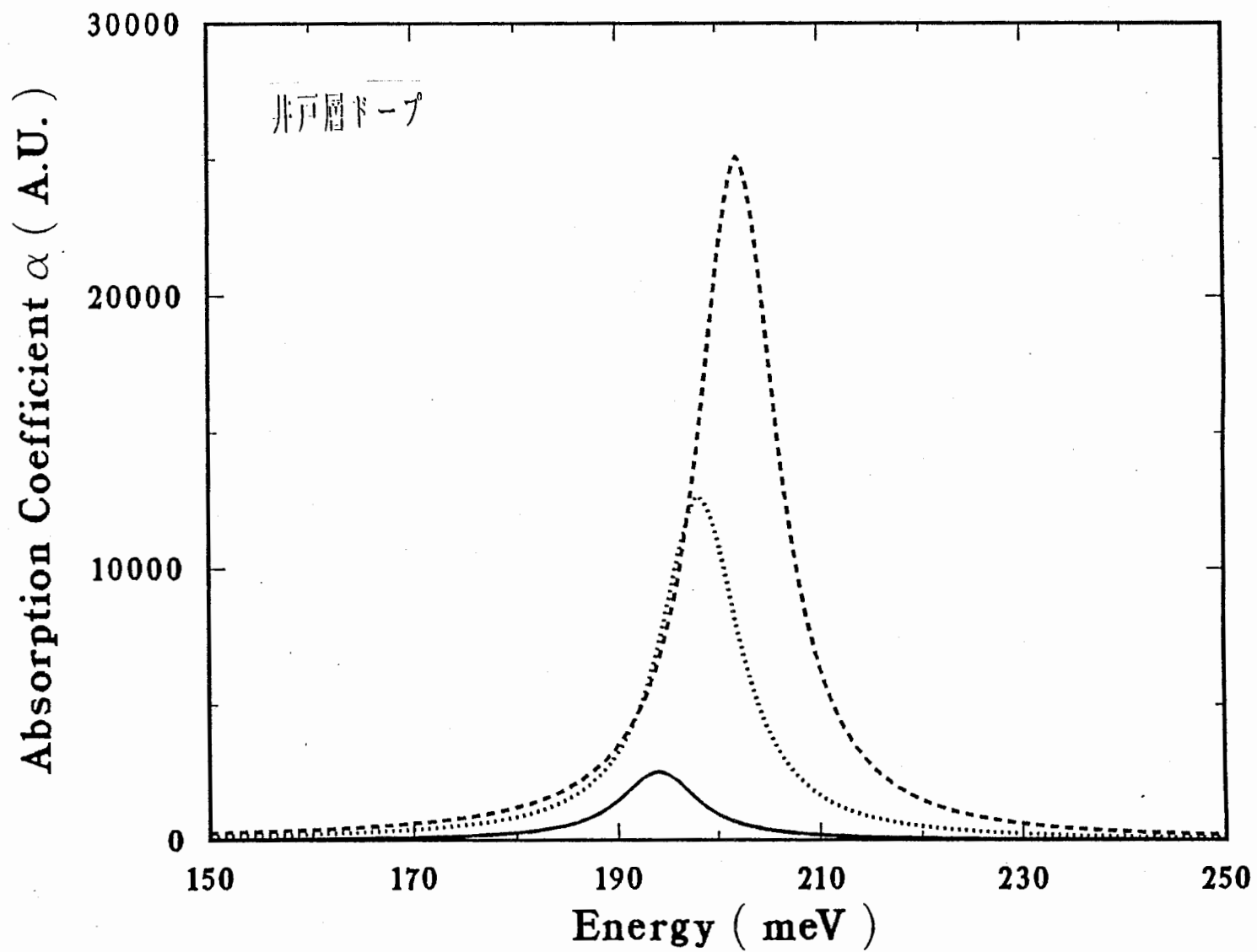


図 5.3 井戸層ドーパ構造における吸収スペクトルの変化

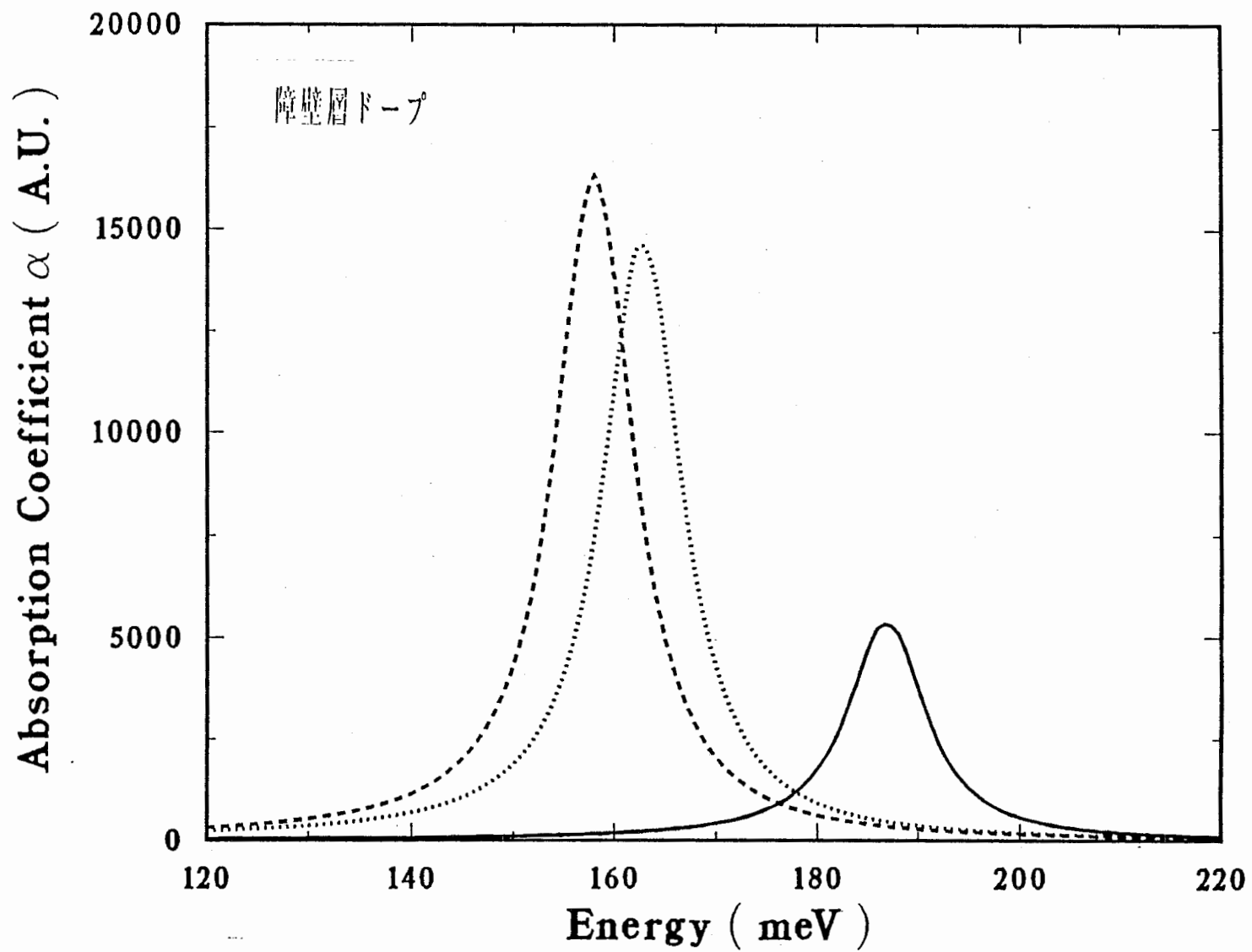


図 5.4 障壁層ドーピング構造における吸収スペクトルの変化

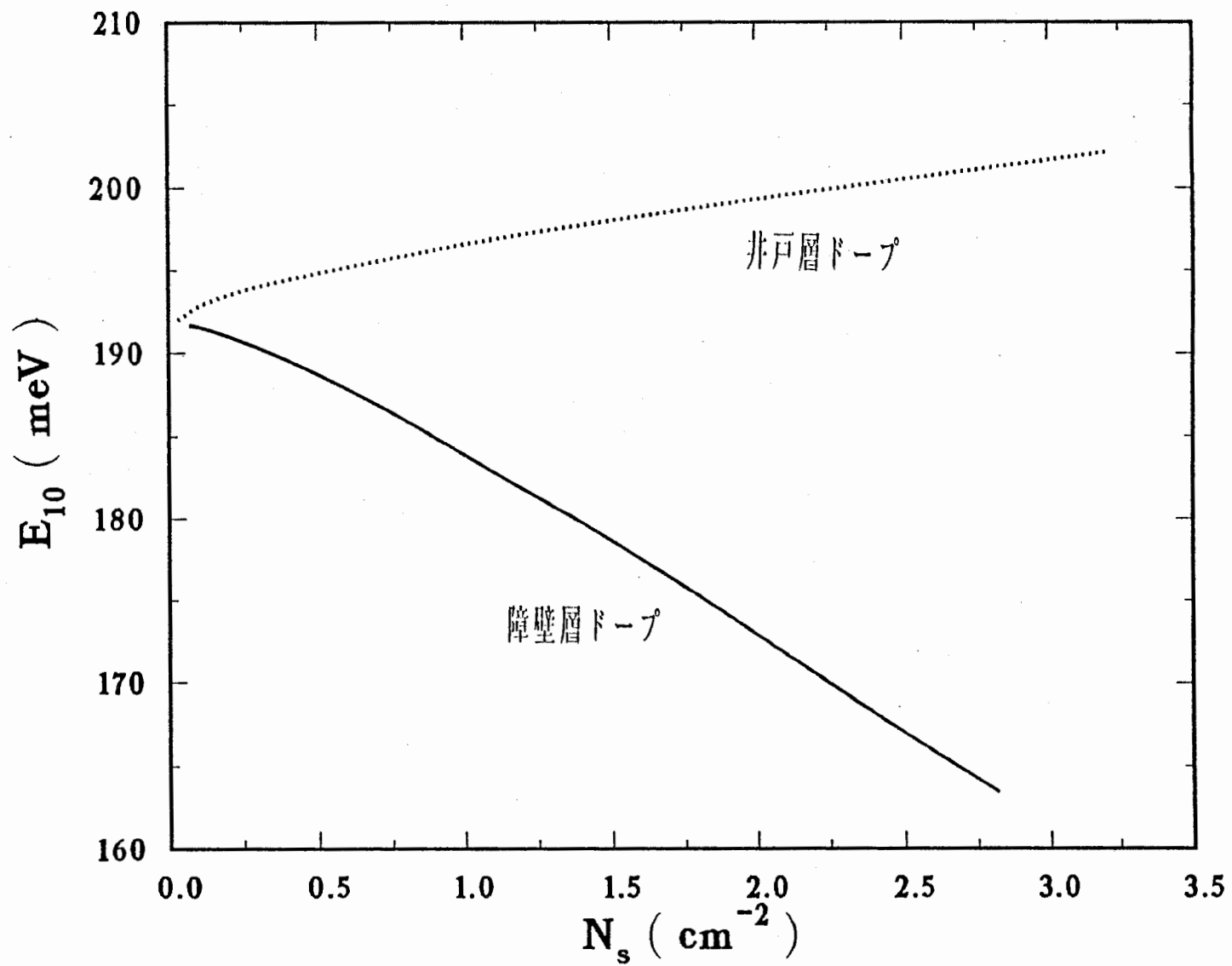


図 5.5 吸収ピークエネルギーの電子面密度依存性

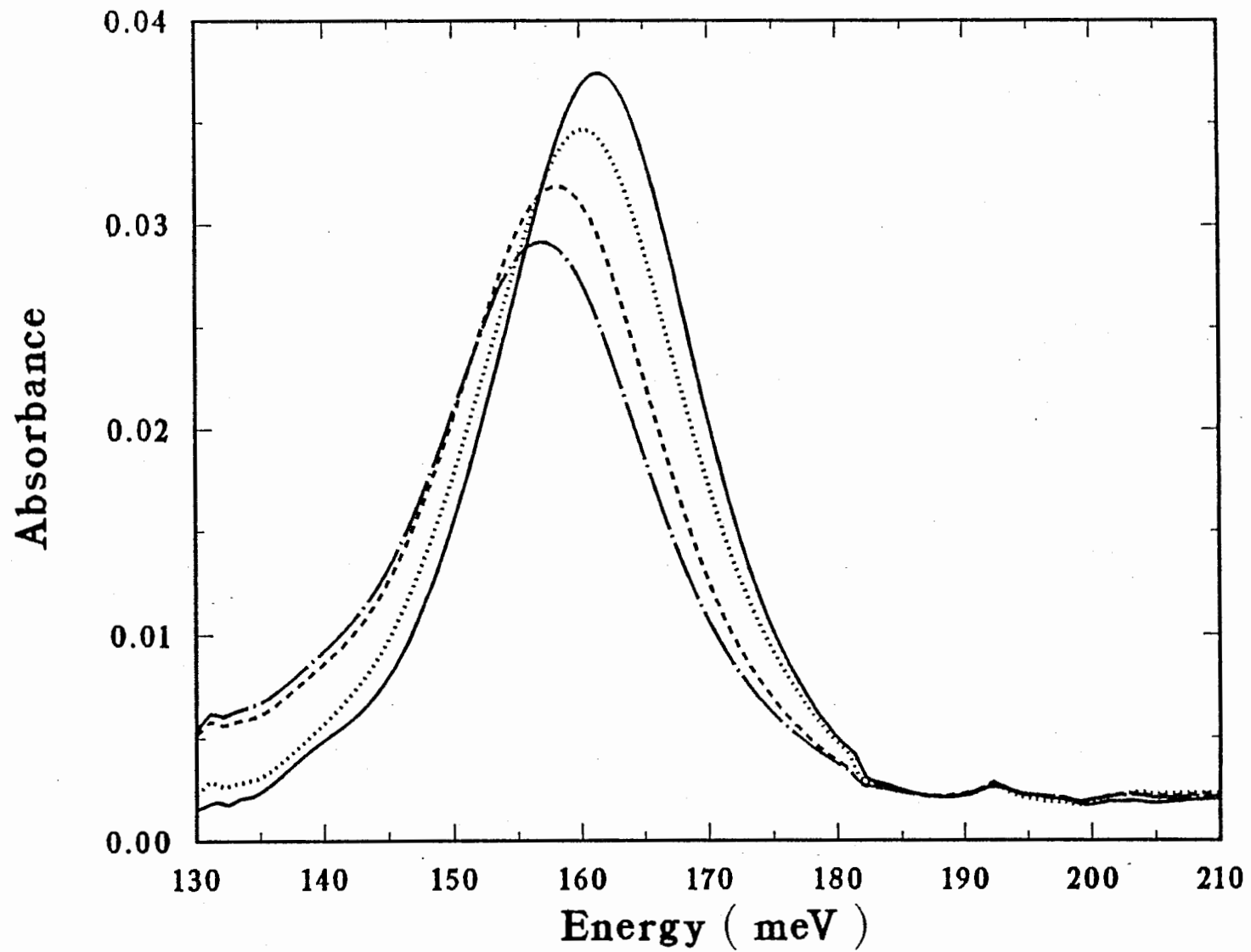


図 5.6

レーザー照射による吸収スペクトルの変化 (実験結果)

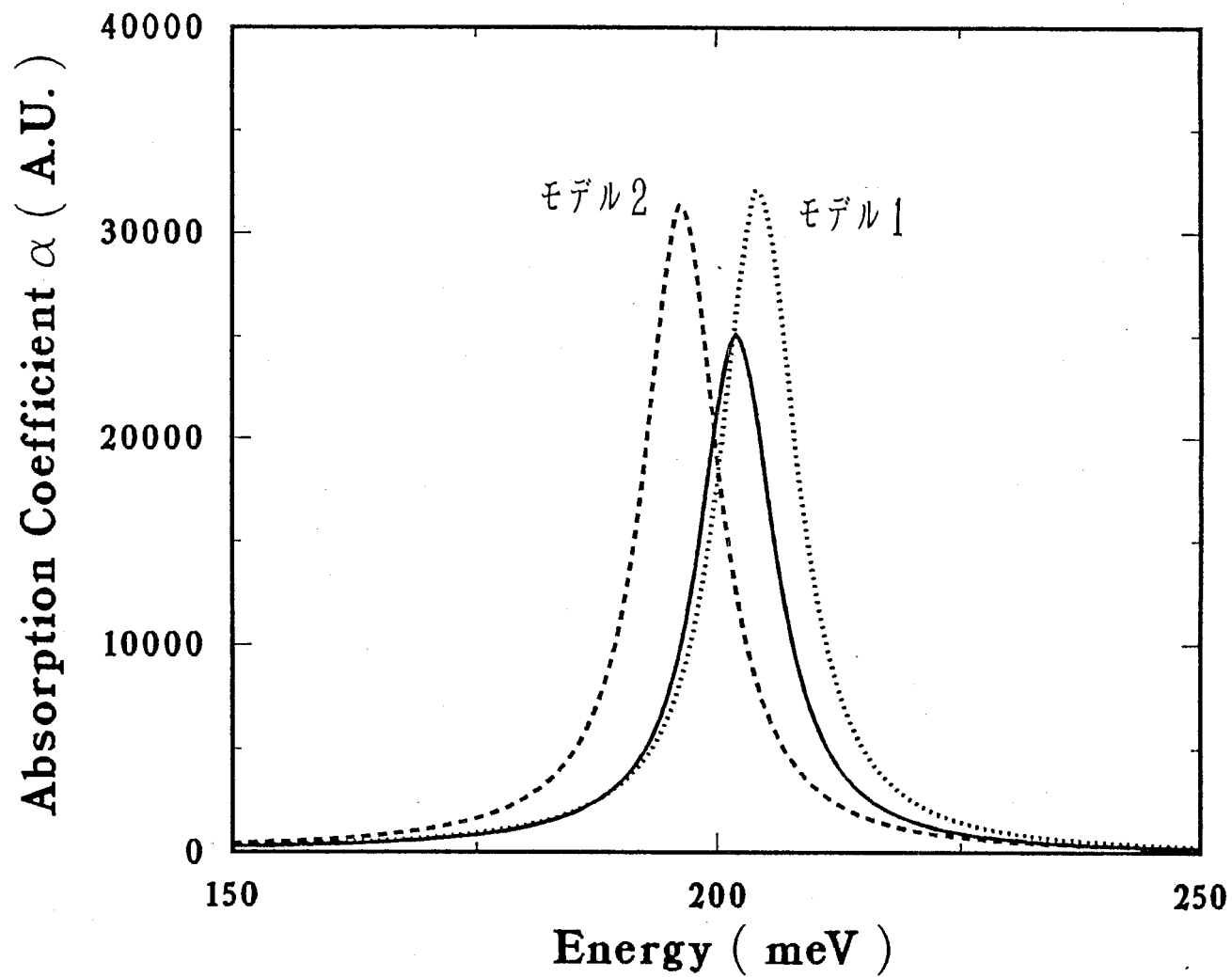


図 5.7 2つのモデルによる吸収スペクトルの変化

選択ドーピング量子井戸構造におけるサブバンド構造をセルフコンシステントな計算により求め、電子面密度の構造依存性について調べた。得られた結果としては、次のようになる。

(1) 井戸内蓄積電子面密度にドーピング濃度依存性があり、高濃度ドーピングする事により、飽和特性があらわれてくる。この、飽和領域では量子井戸の優位性が弱くなるため、飽和しないように構造設計する必要がある。

(2) 高濃度ドーピング領域では、井戸内蓄積電子面密度はスペーサー層幅に大きく依存し、スペーサー層幅が厚いほど井戸内電子面密度は少なく、スペーサー層幅が狭いほど多なる。しかし、スペーサー層幅を狭くすると量子井戸からの発光強度が減少する。

さらに、サブバンド構造を求めるプログラムの計算結果を用いて、サブバンド間吸収のスペクトルを求めるプログラムを作成し、その構造依存性について調べた。得られた結果としては、以下のようになる。

(1) 量子井戸構造に対し障壁層ドーピングすると、振動子強度は弱くなり、井戸層ドーピングすると強くなるため、サブバンド間吸収を行なうには、井戸層ドーピング構造が有利である。

(2) 吸収ピークエネルギーは障壁層ドーピングにより低エネルギー側にシフトし、井戸層ドーピングにより高エネルギー側にシフトする。吸収係数の最大値は、電子面密度が高くなるほど増加する。

本研究で行った以上のような計算機解析は、実際に選択ドーピング量子井戸試料を作製する時、実験結果の考察を行う時、さらには選択ドーピング量子井戸の物性を理解する上で大変有用であった。

以上のような成果が得られたが、問題点も少なくはない。

(1) 高濃度領域における井戸内蓄積電子面密度を実験で求めるのが困難であり、計算結果を確認するのが難しい。また、高濃度ドーピングするとS iが深い準位を作る。この効果は計算に入っていない。

(2) サブバンド間吸収エネルギーの実験値に対して、計算値が数十meVほど大きくなる。この原因としては、計算においては有効質量が単一であると仮定して行なっているが、実際にはバンドの非放物線性により励起準位の有効質量は基底準位より大きくなる、ことがあげられる。これを、考慮に入れると計算値は小さくなり、実験値に近い値が得られると思われる。

本報告では基本的な量子井戸構造のみを取り上げたが、最近では結晶成長技術の進歩により、階段型、非対称型、2重結合型、さらには放物線型の量子井戸構造も作製されるようになってきている。構造が微細化してきているため、直接構造確認をする事が現在の分析技術では困難になってきている。このような状況下で、計算機解析により構造を探ることがますます重要になってくる。そのような種々の構造に対する解析プログラムを引続き作成する必要があると考える。

謝辞

本研究遂行に際し、常に暖かい理解と幾多の便宜を図っていただいた古濱洋治社長、小林規矩男室長、藤本勲前室長に感謝する。また、鎌田憲彦博士、片浜久博士には有益な議論をしていただいた。サブバンド構造を求める計算は、東京大学物性研究所安藤恒也助教授にプログラムを参考にさせていただいた上、多くの助言をいただいた。これらの、諸氏に深く感謝の意を表す。最後に日頃有益な討論をしていただいた通信デバイス研究室の方々に感謝する。

参考文献

- [1] 日本物理学会編：『半導体超格子の物理と応用』，培風館（1984）。
- [2] R.Dingle, H.L.Stormer, A.C.Gossard and W.Weigmann: Appl. Phys. Lett. 33 (1978) 665.
- [3] N.Kamata, H.Tsuchiya, K.Kobayashi and T.Suzuki: Jpn. J. Appl. Phys. 26 (1987) L1082.
- [4] K.Uomi, T.Mishima and N.Chinone: Appl. Phys. Lett. 51 (1987) 78.
- [5] T.Ando and S.Mori: J. Phys. Soc. Jpn. 47 (1979) 1518.
- [6] L.C.West and S.J.Eglash: Appl. Phys. Lett. 46 (1985) 1156.
- [7] A.Seilmeier, H.J.Hubner, G.Abstreiter, G.Weimann and W.Schlapp: Phys. Rev. Lett. 59 (1987) 1345.
- [8] R.J.Bauerle, T.Elsaesser, W.Kaiser, H.Lobentanzer, W.Stoltz and K.Ploog: Phys. Rev. B 38 (1988) 4037.
- [9] F.H.Julien, J.M.Lourtioz, N.Herschkorn, D.Delacourt, J.P.Pocholle, M.Papuchon, R.Planel and G.LeRoux: Appl. Phys. Lett. 53 (1988) 116.
- [10] B.F.Levine, K.K.Choi, C.G.Bethea, J.Walker and R.J.Malik: Appl. Phys. Lett. 50 (1987) 1092.
- [11] B.F.Levine, C.G.Bethea, G.Hasnain, J.Walker and R.J.Malik: Appl. Phys. Lett. 53 (1988) 296.
- [12] G.Hasnain, B.F.Levine, C.G.Bethea, R.A.Logan, J.Walker and R.J.Malik: Appl. Phys. Lett. 54 (1989) 2515.
- [13] A.Harwit and J.S.Harris, Jr.: Appl. Phys. Lett., 50 (1987) 685.
- [14] P.von Allmen, M.Berz, F.-K.Reinhart and G.Harbeke: Superlattices and Microstructures, 5 (1989) 259.

- [15] 尺田幸男、片浜久、土屋博、鎌田憲彦：応物 88 年秋.
- [16] 尺田幸男、土屋博、片浜久：応物 89 年春.
- [17] D.Ahn and S.L.Chuang: Phys. Rev. B 35 (1987) 4149.
- [18] M.Olszakier, E.Ehrenfreund, E.Cohen, J.Bajaj, G.J.Sullivan and D.Miller: Supperlattices and Microstructures, 5 (1989) 283.
- [19] H.Tsuchiya, Y.Shakuda, H.Katahama: 4th Int. Conf. on Modulated Semiconductor Structures, Ann Arbor (1989).