

深紫外レーザーダイオードの低閾値化に向けた 構造検討とデバイス作製

理工学専攻 物質科学コース

主指導教員: 矢口裕之

副指導教員 1: 本多善太郎

副指導教員 2: 八木修平

副指導教員 3: 平山秀樹

糸数 雄吏

2023年3月

目次

第1章	序論	1
1.1.	緒言	1
1.2.	窒化物半導体の特徴	2
1.3.	低閾値化に向けて	4
1.3.1.	レーザ発振の条件	4
1.3.2.	成長基板の選択	5
1.3.3.	p型ドーピング	6
1.4.	深紫外 LD の報告	6
1.5.	本論文の目的と構成	8
第2章	シミュレーション計算と導波路解析の併用による構造検討	10
2.1.	緒言	10
2.2.	計算手法	10
2.3.	妥当性の検証	13
2.4.	転位密度依存性	19
2.5.	井戸構造依存性	25
2.6.	コア層 Al 組成依存性	30
第3章	EBL および Mg ドーピングの導入による注入効率の改善	38
3.1.	緒言	38
3.2.	Cp ₂ Mg 流量依存性	38
3.2.1.	実験方法	38
3.2.2.	結果と考察	41
3.3.	シミュレーション計算による改善機構の検討	47
3.3.1.	注入効率のコア層 Mg 濃度依存性	47
3.3.2.	注入効率のコア層 Mg 濃度依存性(E _A = 170 meV)	51
3.3.3.	部分ドーブ構造における注入効率のコア層 Mg 濃度依存性(E _A = 170 meV)	54
3.4.	部分ドーブ試料における Cp ₂ Mg 流量依存性	59
3.4.1.	実験方法	59
3.4.2.	結果と考察	61
3.5.	全体ドーブ試料と部分ドーブ試料の比較	62
3.5.1.	実験方法	62
3.5.2.	結果と考察	63

3.6.	EBL 導入効果の検討.....	67
3.6.1.	実験方法.....	67
3.6.2.	結果と考察.....	68
3.7.	シミュレーション計算による EBL 効果の検討.....	74
3.7.1.	EBL 効果の検討.....	74
3.7.2.	EBL 膜厚依存性.....	78
第 4 章	活性化エネルギーの Mg 濃度・電界強度依存性.....	83
4.1.	緒言.....	83
4.2.	従来モデルの検討.....	83
4.2.1.	Götz のモデル.....	83
4.2.2.	幾何学的因子の検討.....	84
4.2.3.	イオン化率を考慮した Götz のモデル.....	89
4.3.	新規モデルの検討.....	91
4.3.1.	高濃度化に伴う活性化エネルギーの減少.....	91
4.3.2.	遮蔽を考慮したモデル.....	94
4.3.3.	クーロンポテンシャルの重なりを考慮したモデル.....	96
4.3.4.	遮蔽・クーロンポテンシャルの重なりを考慮したモデル.....	98
4.3.5.	中間準位を考慮したモデル.....	100
4.4.	プール・フレンケル効果の検討.....	107
4.4.1.	プール・フレンケル効果.....	107
4.4.2.	イオン化率の計算.....	108
4.4.3.	イオン化率の電界強度依存性.....	113
4.5.	注入効率の計算.....	116
第 5 章	深紫外 LD デバイスの作製.....	122
5.1.	緒言.....	122
5.2.	デバイス作製.....	122
5.2.1.	プロセス一覧.....	122
5.2.2.	導波用リッジ形成.....	124
5.2.3.	n 電極、p 電極形成.....	126
5.2.4.	ミラー形成.....	128

5.2.5.	SiO ₂ 窓開け(n 電極、p 電極の露出).....	131
5.2.6.	金パッド蒸着(p 電極).....	132
5.3.	EL 測定による作製試料の評価.....	135
5.3.1.	実験方法.....	135
5.3.2.	結果と考察.....	136
第6章	総括	140
参考文献	143
謝辞	150
研究業績	150

第1章 序論

1.1. 緒言

レーザダイオード(LD)は、小型、長寿命、低消費電力等の利点を有し、様々な波長帯での実現が望まれている。可視光線より波長の短い光は紫外線と呼ばれる。さらに、紫外線はその波長に応じて、UVA(315 - 380 nm)、UVB(280 - 315 nm)、UVC(200 - 280 nm)と呼び分けられている。特に、波長 200 - 300 nm 程度の紫外線は、深紫外光(Deep-Ultraviolet: DUV)と呼ばれ、幅広い分野で優れた応用を有し[1-4]、その実用化への期待は大きい(図 1-1)。紫外光の中でも波長 280 nm 以下の UVC 光は、すべてオゾン層で吸収されるため、本来、地上には存在しない特殊な光であり、その性質もまた特殊である。UVC 光は水や空気の清浄・殺菌[5,6]、センシング、通信、ヘルスケア・医療分野など多様な応用を有する。特に、UVC 光照射による殺菌は、塩素や薬剤を用いることなく効果的にウイルス、細菌の殺菌・無害化が可能のため、クリーンで薬剤耐性菌の出現リスクのない殺菌を可能にする。また、近年、猛威を振るっている COVID-19 に対する有効性も確認されており[7,8]、深紫外光源に対する関心はさらなる高まりを見せている。また、通常、地上に存在しない UVC 光は太陽光の背景ノイズの影響を受けない通信・センシングを可能にする。このような利点を有する深紫外光源は、今後、多岐にわたる領域において重要な役割を担うことが期待されている。

これら優れた応用を有する深紫外発光デバイスの材料としては、III 族原子(Al、Ga)と窒素の化合物である $Al_xGa_{1-x}N$ 系窒化物半導体を用いられる。短波長 LD の作製には、高 Al 組成の AlGa_xN の使用が求められる。なお、紫外域の LED においては、発光波長の短波長化(高 Al 組成化)に伴い、著しく発光効率が減少することが知られている[9]。短波長化に伴う効率の低下は種々の要因によるが、主要なものとして、ドーピングに関する問題とキャリア注入に関する問題が挙げられる。Al 組成の増加に伴い、ドナーとして用いられる Si、アクセプタとして用いられる Mg の活性化エネルギーが増加し、n 型、p 型層の形成が困難になる[10-12]。特に、p 型 AlGa_xN 層の正孔濃度は低く、その傾向は Al 組成の増加に伴い、より顕著になる。また、p 型特性の劣化に伴い注入効率の低下が引き起こされることが知られている[13]。この p 型層の形成に関する問題は、LD の実現においても重大な課題である。また、アクセプタとして用いられる Mg は紫外光に対し吸収を持つため、Mg のドーピングは内部損失の増加の要因となる。そのため、LD の構造設計においては、Mg のドーピング領域とドーピング濃度の選択には慎重を要する。これらの問題により、レーザ発振に求められる光学的・電氣的な要件を同時に満たす p 型層の形成は困難であり、短波長 LD の実現の大きな障害となっていた。

本章では、窒化物半導体の特徴、LD の低閾値化に求められる条件を述べた後、深紫外 LD の報告について概観する。最後に本論文の構成について述べる。

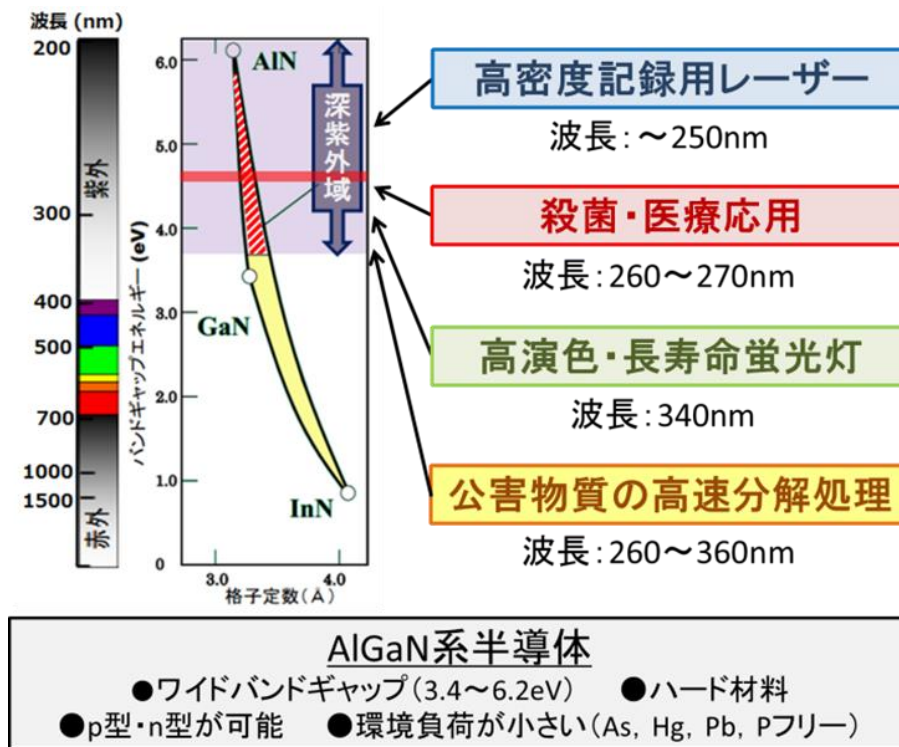


図 1-1 深紫外光源の応用用途

1.2. 窒化物半導体の特徴

III 族窒化物半導体は、III 族元素である B、Al、Ga、In と N の化合物である。特に、GaN、AlN、InN はいずれも室温で安定なウルツ鉱(WZ)型構造をとり、直接遷移型のバンド構造を持つ。それらの混晶である $Al_xGa_yIn_{1-x-y}N$ もまた直接遷移型のバンド構造を有し、高い発光再結合確率を示すため、発光素子の材料として適当である。また、V 族元素の中で最軽元素である N との化合物であるウルツ鉱型窒化物半導体は、ワイドバンドギャップ、化学的・機械的に堅牢、高い熱伝導度などの特徴を有する。室温における AlN、GaN、InN のバンドギャップはそれぞれ 6.2、3.4、0.7 eV であり、これらの混晶である $Al_xGa_yIn_{1-x-y}N$ を用いることで、近赤外から深紫外域までの発光・受光素子の作製が可能である。また、III 族窒化物は、水銀やヒ素などの有害な元素を含まないために環境負荷が小さいなどの利点を持つ。

また、III 族窒化物の特徴のひとつとして巨大な分極が挙げられる。III 族元素(Ga、Al、In) と V 族元素間の電気陰性度の差により、III 族原子は正に、V 族原子は負に帯電し、イオン分極を生じる。図 1-2 の吹き出しに示されるように、原子が正四面体形状に配置していれば、4 つの分極ベクトルは互いに相殺し分極は生じない。正四面体の場合は、c 軸と a 軸の

格子定数比(c/a)が $\sqrt{8/3}$ ($\cong 1.633$)となる。しかし、III族窒化物においては、平衡状態で、正四面体からやや歪んだ形状をしているため、 $[0001]$ 軸方向に分極を生じる。平衡状態において生じているこの分極を自発分極と呼ぶ。また、面内に歪みが加わった場合、分極ベクトルの均衡が変化するため、結晶中に分極を生じる。これをピエゾ分極と呼ぶ。自発分極の値は、AlN、GaNのそれぞれにおいて、 -0.0081 、 -0.029 C/m²である。AlGaInにおける自発分極はAlNとGaNの線形補間で表すことができる。したがって、AlGaInの自発分極はAl組成のみに依存する。一方、ピエゾ分極は、Al組成と歪状態に依存する。結晶中の分極 P は、これら自発分極 P_{sp} とピエゾ分極 P_{pz} の和で表される。

$$P = P_{pz} + P_{sp} \quad (1-1)$$

$$P_{sp} = -0.0081x - 0.0029(1-x) \quad (1-2)$$

$$P_{pz} = 2 \left(e_{31} - \frac{C_{13}}{C_{33}} e_{33} \right) \left(\frac{a_s}{a_e} - 1 \right) \quad (1-3)$$

ここで、 x はAl組成、 e は圧電定数、 C は弾性定数、 a_s は着目する層の a 軸の格子定数、 a_e は無歪のときの a 軸の格子定数である。窒化物半導体においては、上の式より計算される分極の値が大きく、デバイス特性に重大な影響を及ぼす。

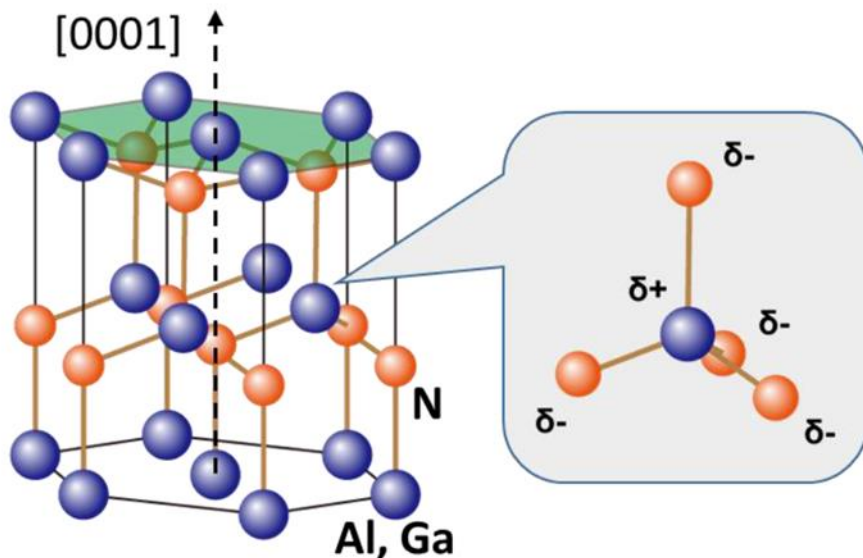


図 1-2 III族窒化物における分極の発現

1.3. 低閾値化に向けて

1.3.1. レーザ発振の条件

レーザ発振の条件は、光が共振器を 1 往復して得られる利得と損失が等しくなることである(図 1-3)。このとき、共振器を一巡した光強度が元の光強度と等しく、発振は持続される。

活性層の利得を g 、光閉じ込め係数を Γ 、共振器長を l 、ミラー端面の反射率を R 、内部損失を α_i とすると、レーザ発振の条件は次式で表される。

$$R_1 R_2 e^{(\Gamma g - \alpha_i) 2l} = 1 \quad (1-4)$$

上式を変形すると、次の関係式が得られる。

$$\Gamma g - \alpha_i = \alpha_m \quad (1-5)$$

ここで、左辺は正味のモード利得である。右辺はミラー損失であり、次式で与えられる。

$$\alpha_m = -\frac{1}{2l} \ln(R_1 R_2) \quad (1-6)$$

レーザ発振の条件は、ミラー損失と等しいネットモード利得を得ることである。したがって、低閾値化を実現するには、ネットモード利得を大きくし、ミラー損失を小さくする必要がある。ミラー損失を小さくするには、ミラー端面の反射率を上げること、共振器長を長くすることが求められる。ネットモード利得を上げるには、光閉じ込め係数を増加させること、内部損失を低減させること、利得を増加させることが求められる。

LD の低閾値化を達成するには、ネットモード利得を最大化するエピタキシャル構造が求められる。そのための条件として、特に、次の 3 点が重要である。第一に、高品質の AlGaIn 結晶の成長(低転位密度の成長基板)。第二に、良好な電気特性を有する n、p 型層の形成。第三に、光閉じ込めと、キャリア閉じ込めを両立させるコア、クラッド層構造。なお、実際には各所にトレードオフの関係を抱えており、電氣的・光学的要請を同時に満たし、ネットモード利得を最大化するには、種々の要因を考慮した緻密な構造設計が求められる。

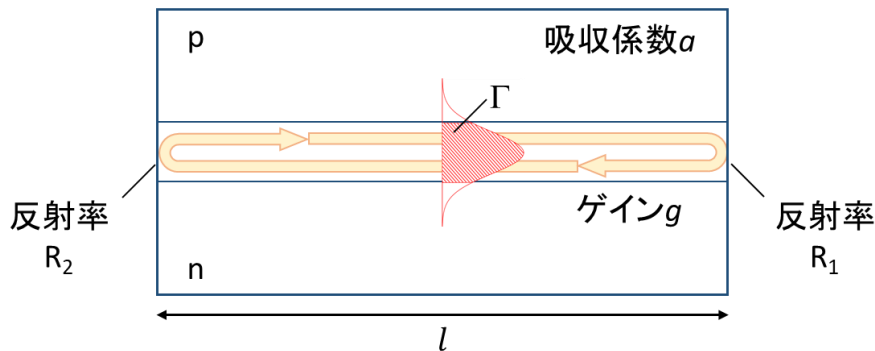


図 1-3 ファブリペロー共振器における半導体レーザの発振条件

1.3.2. 成長基板の選択

AlGaIn の結晶品質は、下地に用いられる成長基板に依存する。AlGaIn 結晶の成長基板としては、広くサファイア基板が用いられている。サファイア基板は熱的・化学的に安定であり、紫外光に対し透明、かつ、安価などの利点を有する。しかし、サファイア基板と AlGaIn 層との間には、大きな格子不整合、熱膨張係数差がある。これによって、多量の一次元欠陥である転位が導入され、エピタキシャル層の品質が損なわれる。実際の成長においては、この格子不整合による結晶性の劣化を緩和させるために、サファイア基板上に AlN を成長し、格子整合性を向上させた AlN 仮想基板が用いられる。

内部量子効率、及び、素子寿命は転位密度によって強く制限されるため[14,15]、発光デバイスの作製において、転位密度の低い高品質成長基板は極めて重要である。LD の作製においても同様である。低閾値化を達成するには、内部損失を低減し、利得を増加させることが求められる。しかし、転位密度の増加に伴い、A 係数の増加によるゲインの減少と、転位による光散乱による内部損失の増加が生じる[16,17]。さらに、転位による内部損失の増加は、短波長化に伴いより顕著になることが予想されている。したがって、ネットモード利得を増加させるには、低転位密度の高品質成長基板を用いて、AlGaIn 層の転位密度を低減する必要がある。

これまで、AlN 仮想基板の低転位化について、多くの研究が行われてきた。近年、高温アニール処理(HTA)と、AlN 再成長による高品質 AlN 仮想基板の作製が実証された[18]。転位は非平衡的に AlGaIn 結晶中に導入される欠陥であり、系の内部エネルギーを増加させる。この転位に伴う歪エネルギーの増加は、転位密度を減少させる駆動力となり得る。高温アニール処理時、転位に伴い蓄積された歪エネルギーの解放を通じて、結晶の再結晶化が進行し、結晶品質が改善する[19]。近年、この高温アニール処理と AlN 再成長を用いた AlN 仮想基板の高品質化が進められており[20-26]、現在、転位密度が 10^7 cm^{-2} 程度の低転位 AlN 仮想基板が報告されている[27]。これは、サファイア基板上の AlN としては非常に高品質であ

る。また、高温アニール処理と AlN 再成長を経た AlN 仮想基板上に成長された AlGaIn 量子井戸において、室温で 90% の極めて高い内部量子効率が報告されており [28]、短波長 LD の成長基板として有力な候補であると考えられる。また、実際の深紫外 LED デバイスにおいても高温アニール処理により作製された AlN 仮想基板を用いることで、高い外部量子効率を得られることが確認されている [19,29,30]。

また、AlN 単結晶基板は極めて高品質の結晶性を有するため、AlGaIn 結晶の成長基板として有力な候補のひとつである。なお、AlN 単結晶基板はコスト面において、大きなデメリットを抱えており、実用化へのハードルは高い。

1.3.3. p 型ドーピング

アクセプタとして用いられる Mg の活性化エネルギーは GaN で 170 meV と高く、室温におけるイオン化率は低い。さらに、AlN においては Mg の活性化エネルギーは 470 meV とさらに高くなる。AlGaIn の Al 組成の増加に伴い、Mg の活性化エネルギーが増加するため、Al 組成の増加に伴い p-AlGaIn 層の正孔濃度は著しく減少する。また、高正孔濃度を得るために、高濃度の Mg をドーピングすると、Mg の表面偏析が生じ、逆三角形型のドナー性欠陥を形成する [31]。これにより、正味のアクセプタ濃度が減少し、アクセプタ濃度の増加に伴い、正孔濃度が下がるようになる。また、p 型化に対する自己補償の要因として、窒素空孔の形成も指摘されている。窒素空孔はドナー性欠陥であり、その形成エネルギーはフェルミ準位が価電子帯に近づくほど減少する [32,33]。つまり、p 型化が進むほど、ドナー性欠陥が生じやすくなり、伝導性制御は困難になる。さらに、ドナー性欠陥である窒素空孔の形成エネルギーは Al 組成の増加に伴い減少する。したがって、AlGaIn 結晶においては、高い活性化エネルギーと、自己補償欠陥の形成のために、p 型層の形成が困難であり、かつ、その傾向は Al 組成の増加に伴いより顕著になる。また、アクセプタとして用いられる Mg は紫外光に対し吸収を持つため、不用意な Mg ドーピングは内部損失を増加させ、ネットモード利得を減少させる懸念がある。

1.4. 深紫外 LD の報告

近年、UVC [34]、UVB [35] 領域におけるレーザ発振が報告され、深紫外域への波長拡大が大きく進展している [36]。2019 年に発振波長 271.8 nm の UVC-LD の室温パルス発振が報告された。翌年 2020 年に、発振波長 298 nm の UVB-LD の室温パルス発振が報告された。現在、LD の最短波長は 271.8 nm である。また、続く精力的な研究により、これら深紫外 LD の特性向上が急速に進められている [37–43]。さらに、2022 年に波長 274 nm の UVC 領域に

において深紫外 LD の室温連続発振が報告され[43]、深紫外 LD の今後の展開に大きな関心が寄せられている。

先に述べたように、深紫外 LD の実現、その低閾値化には、高品質の AlGaIn 結晶の成長(低転位密度の成長基板)、良好な電気特性を有する n、p 型層の形成、光閉じ込めとキャリア閉じ込めを両立させるコア、クラッド層構造が重要である。ここでは、これら問題に対するアプローチと関連付けて、レーザ発振の報告されている UVC、UVB-LD の構造について概観する。

まず、欠陥制御について確認する。UVC-LD においては、成長基板として AlN 単結晶基板が用いられている。AlN 単結晶基板はコスト面においてデメリットを持つものの、その結晶品質は極めて高く、その転位密度はわずか $10^3 - 10^4 \text{ cm}^{-2}$ 程度である。UVC-LD では、AlN 単結晶基板を使用することにより、極めて高品質の AlGaIn 結晶の成長を実現し、転位に由来する利得の減少と内部損失の増加を最低限に抑えている。また、AlN 単結晶基板の優位性を保持するため、n 側クラッド層の膜厚を 350 nm と薄くしている。これは、格子緩和による欠陥導入を抑制するためである。

一方、UVB-LD においては、成長基板として AlN 単結晶基板ではなく、より安価なサファイア基板が用いられている。これは、波長 300 nm の UVB-LD 構造においては、AlN 単結晶基板を用いても、低転位化が困難なためである[44,45]。比較的低い Al 組成を用いる UVB-LD においては、AlN 単結晶基板とエピタキシャル層との格子不整合が大きく、AlN 単結晶基板上の AlGaIn に多量の転位密度が導入され、AlN 単結晶基板の優位性が活かされないことが報告されている。レーザ発振の報告されている UVB-LD の成長基板は、サファイア基板上にスパッタにより AlN を堆積した後、高温アニール処理、及び、MOCVD 法による再成長を施すことで作製されている[46]。この AlN 仮想基板上に、0.9 μm の Ga ドープ AlN を成長した後、9 μm の n 側クラッド層が積層されている。この点は欠陥導入を抑制するために n 側クラッド層を薄くしている UVC-LD とは好対照である。ここでは、AlN 仮想基板と AlGaIn 層の間に Ga ドープ AlN のホモエピタキシャル層を挿入することにより、AlGaIn の初期成長段階において三次元成長を誘起している。成長初期の三次元成長による転位の曲がりによって、歪緩和の促進と低転位化が図られている。続く 9 μm の AlGaIn 成長を通じて、成長モードは二次元成長にシフトし、平坦な表面、低転位密度、100%に近い緩和率を達成している。このときの活性層近傍の転位密度として、 $1.0 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ 程度の比較的低い転位密度が報告されている[42]。また、下地層の歪緩和に伴い活性層の発光特性が向上することが報告されており[47,48]、厚膜化による AlGaIn 層の完全緩和は利得の増加に寄与しているものと考えられる。

続いて、p 型ドーピングについて確認する。先に述べたように、アクセプタとして用いられる Mg の活性化エネルギーが高いために、高 Al 組成 AlGaIn においては高い正孔濃度を得ることが困難である。また、Mg は紫外光に対し吸収を持つため、光を閉じ込めるコア層、光の染み出しが無視できないコア層近傍への Mg ドープは内部損失の増加につながる。この

問題に対するアプローチとして、UVC、UVB-LD ともに分極ドーピング構造を用いている。分極ドーピングは窒化物半導体に特徴的な巨大な分極を利用したドーピング手法であり、不純物を添加することなく高正孔濃度が得られることが期待されている[49]。分極を有する異種材料間のヘテロ接合では、それぞれの材料の有する分極電荷が異なるため、その界面に差分の分極電荷が残存する。巨大な分極を有する AlGaIn 材料では、急峻なヘテロ界面において、この界面電荷により 10^{13} cm^{-2} にも及ぶ 2 次元電子(正孔)ガスを形成することが可能であり、電界効果トランジスタなどに積極的に利用されている。分極ドーピングでは、Al 組成を連続的に変化した組成傾斜構造を用いることで、ヘテロ界面を連続的に配置し、3 次元状のキャリア分布の実現を狙う。

1.5. 本論文の目的と構成

本論文では、深紫外 LD の低閾値化を目的として、深紫外 LD の構造検討を行う。特に、深紫外 LD の低閾値化において重要な課題である注入効率の改善に着目する。波長 300 nm の UVB-LD において 3.5% の注入効率の推定値が報告されている[41]。また、短波長化に伴い、さらに注入効率が減少することが予想される。深紫外 LD の注入効率には、多大な改善の余地があり、深紫外 LD の低閾値化、さらなる短波長 LD の実現には注入効率の改善は必須である。

以下に本論文の構成を示す。

第1章 序論

本章では、本研究で用いた III 族窒化物の特徴について述べた。また、UVC、UVB 領域においてレーザ発振が報告されている LD 構造を参考に、レーザ発振・低閾値化における課題とアプローチを概観した。

第2章 シミュレーション計算と導波路解析の併用による構造検討

第 2 章では、深紫外 LD の設計指針を獲得することを目的として、シミュレーション計算と導波路解析を併用し、各種パラメーターがネットモード利得に与える影響について調査する。特に、深紫外 LD 構造における注入効率の低下の要因を精査し、注入効率の改善に求められる構造について検討を行う。

第3章 EBL 及び Mg ドーピングの導入による注入効率の改善

第3章では、p側コア層に電子ブロック層とMgドーピングを導入することで、注入効率が顕著に改善することを実験的に確認する。また、p側コア層のMg濃度が注入効率に与える影響について調査する。さらに、シミュレーション計算を用いて、p側コア層へのMgドーピングによる注入効率の改善機構について検討を行う。これにより、注入効率の改善において、コア/クラッド層界面近傍のイオン化Mg濃度が重要であることを示す。

第4章 活性化エネルギーのMg濃度・電界強度依存性

第4章では、Mgの活性化エネルギーをアクセプタ濃度、及び、電界強度の関数として記述する計算モデルを提案する。この計算モデルを用いて、コア/クラッド層界面近傍のイオン化Mg濃度を計算し、実際のデバイスにおいて、注入効率の向上に寄与し得るイオン化Mg濃度を達成し得るか検討する。

第5章 深紫外LDデバイスの作製

第5章では、LDプロセスにより共振器構造を形成し、室温・パルス駆動で電流注入を行い、EL特性の評価を行う。このとき、p側コア層にEBLとMgドーピングを導入した試料において、共振器構造での高電流注入条件においても高い注入効率を得られるか検証を行う。

第6章 総括

第6章では、各章において得られた知見をまとめる。

第2章 シミュレーション計算と導波路解析の併用による構造検討

2.1. 緒言

低閾値化を実現するには、光閉じ込め係数を増加させること、内部損失を低減させること、利得を増加させることが求められる。なお、各所にトレードオフの関係を抱えており、電氣的・光学的要請を同時に満たし、低閾値化を実現するには、種々の要因を考慮した緻密な構造設計が求められる。

十分な光閉じ込めを実現するには、導波路は適当な膜厚、屈折率差を有するコア層とクラッド層から構成されなければならない。また、内部損失を低減するには、内部損失の要因を排すこと、光強度分布と吸収層のオーバーラップを十分に下げることが求められる。AlGa_N系深紫外 LD における内部損失の原因としては、バンド間遷移による光吸収、自由キャリア吸収、アクセプタとして用いられる Mg の光吸収、転位による散乱損失などがあげられる。特に、AlGa_N は Al 組成の増加に伴い、p 型層の電氣的特性が劣化するため、p 側コンタクト層には GaN が用いられる。GaN は深紫外光に対し、バンド間遷移による強い吸収をもつため、低 Al 組成の吸収層と活性層を十分に離し、光強度分布が吸収層と重ならないように各層の膜厚を設計する必要がある。また、アクセプタとして用いられる Mg は紫外光を吸収するため、Mg のドーピング領域とドーピング濃度は慎重に選択する必要がある。利得は活性層のキャリア密度におおよそ比例するため、活性層へのキャリアの閉じ込めを強化し、十分なキャリア密度が得られる構造設計を行う必要がある。

本章では、深紫外 LD の設計指針を獲得することを目的として、シミュレーション計算と導波路解析を併用し、各種パラメーターがネットモード利得に与える影響について調査した。

2.2. 計算手法

深紫外 LD 構造の設計指針を得ることを目的として、シミュレーション計算と導波路解析の併用による構造検討を行った。

シミュレーション計算では、シミュレーションソフトウェア SiLENSe 6.3 を用いて、利得の電流密度依存性について計算を行った。導波路解析では、x、y 方向に一様なスラブ導波路を仮定し、z(結晶成長)方向に境界条件を適用することで光強度分布を算出し、光閉じ込め係数と内部損失の計算を行った。内部損失の計算では、バンド間遷移による光吸収、Mg による光吸収、自由キャリア吸収、転位による散乱損失の影響を考慮した。計算に用いたパラメーターは SiLENSe のデータベースを参照した。

以下、導波路解析の計算手法について詳述する。

屈折率、バンド間遷移による光吸収、自由キャリア吸収については SiLENSe の計算方法に則った。Mg による光吸収[50]、転位による散乱損失[17]についてはそれぞれ文献の計算方法に従った。

エネルギー E の光に対する屈折率 n は次式を用いて計算した。

$$n = \sqrt{A_1 \frac{E_1^2(E_1^2 - E^2)}{(E_1^2 - E^2)^2 + E^2\Gamma_1^2} + A_0 \frac{\Gamma_0^2 E(2E_0 - E)}{(E_0^2 + \Gamma_0^2)[(E - E_0)^2 + \Gamma_0^2]} + \epsilon_\infty} \quad (2-1)$$

屈折率の計算に用いた光学パラメーターを表 2-1 にまとめる。AlGaIn の光学パラメーターについては AlN、GaIn の線形補完により算出した。

表 2-1 AlN、GaIn の光学パラメーター

	AlN	GaIn
E_0 [eV]	6.05	3.6
A_1	1.4	1.1
Γ_1 [eV]	0.8	0.9
E_1 [eV]	8.05	7
ϵ_∞	2.8	4.1
A_0	2.6	1.2
Γ_0 [eV]	0.55	1.1

バンド間遷移による吸収係数 α_{bulk} [cm^{-1}] は次式を用いて計算した。

$$\alpha_{bulk} = \begin{cases} 9.2 \times 10^6 \cdot \left(\frac{E}{E_g} - 1\right) & (E \geq E_g) \\ 0 & (E < E_g) \end{cases} \quad (2-2)$$

ここで、 E は光子のエネルギー、 E_g は材料のバンドギャップである。

自由キャリアによる吸収 α_{free} は次式を用いて算出した。

$$\alpha_{free} = \alpha_n + \alpha_p \quad (2-3)$$

ここで、 α_n 、 α_p はそれぞれ電子、正孔による自由キャリア吸収であり、それぞれ次式で表される。

$$\alpha_n = \frac{q^3 \lambda^2 n}{4\pi^2 \mu_n m_n^2 n_{ref} \epsilon_0 c^3} \quad (2-4)$$

$$\alpha_p = \frac{q^3 \lambda^2 p}{4\pi^2 \mu_p m_p^2 n_{ref} \epsilon_0 c^3} \quad (2-5)$$

ここで、 q は電気素量、 λ は波長、 n は電子密度、 p は正孔密度、 μ は移動度、 m は有効質量、 n_{ref} は屈折率、 ϵ_0 は真空の誘電率、 c は真空の光速である。自由キャリア吸収についてはシミュレーション計算により算出した。

Mg由来の吸収係数 α_{Mg} [cm^{-1}]については次式を用いて計算した[50]。

$$\alpha_{Mg} = 5.0 \times 10^{-19} \cdot N_{Mg} \quad (2-6)$$

ここで、 N_{Mg} [cm^{-3}]はMgの濃度である。

転位による散乱損失 α_{dis} については次式を用いた[17]。

$$\alpha_{dis} = \frac{2}{3} \left(\frac{2\pi\delta}{\lambda} \right)^2 Nw \quad (2-7)$$

ここで、 N は転位密度、 w は光波の横方向の広がり、 δ は光路差である。本計算では w は10 μm とした。また、光路差 δ は次式より計算される。

$$\delta = -\frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} n^3 pb \quad (2-8)$$

ここで、 ν はポアソン比、 n は屈折率、 p は弾性光学定数、 b はバーガースベクトルである。ポアソン比は弾性定数を用いて次式で表される。

$$\nu = \frac{C_{13}}{C_{13} + C_{33}} \quad (2-9)$$

表 2-2 に本計算に用いたパラメーターをまとめる[51]。AlGaIn の計算パラメーターについては、いずれのパラメーターも AlN と GaN の線形補完により算出した。

表 2-2 AlN、GaN の格子定数と弾性定数、弾性光学定数

	AlN	GaN
a [Å]	3.112	3.118
c [Å]	4.982	5.186
C ₁₃ [GPa]	115	105
C ₃₃ [GPa]	385	395
p	-0.100	-0.086

これまでの計算より、位置ごとの吸収係数 α が次式より算出される。

$$\alpha = \alpha_{bulk} + \alpha_{free} + \alpha_{Mg} + \alpha_{dis} \quad (2-10)$$

上式から計算される吸収係数分布と光強度分布を用いて、内部損失 α_i は次式で表される。

$$\alpha_i = \frac{\int dz \cdot \alpha(z) [E_y(z)]^2}{\int dz \cdot [E_y(z)]^2} \quad (2-11)$$

したがって、シミュレーション計算により利得 g が、導波路解析により、光閉じ込め係数 Γ と内部損失 α_i が得られる。これらを用いて、ネットモード利得 g_{net} が次式より求められる。

$$g_{net} = \Gamma g - \alpha_i \quad (2-12)$$

2.3. 妥当性の検証

まず、上述の計算手法の妥当性を検証するため、文献[34]に示された構造について閾値電流密度の計算を行い、上記手法による計算値と文献の報告値の比較を行った。表 2-3 に計算に用いたシミュレーション構造を示す。なお、文献に記載のない項目については適宜補った。転位密度は AlN 単結晶基板上的成長を想定し、 $1.0 \times 10^4 \text{ cm}^{-2}$ とした。

表 2-3 に示すように分極ドープ層は PD1、PD2 の二つに分けられている。PD1 は光閉じ込めのための p 側クラッド層、キャリア閉じ込めのための電子ブロック層を兼ねている。PD2、p-GaN 層は Al 組成が活性層より低くなっているため、活性層からの発光に対し吸収層として働く。したがって、PD1 の膜厚を厚くし、活性層と吸収層との距離を十分にとる必

要がある。

表 2-3 シミュレーション構造

Layer	Thickness [nm]	Al content	Doping [cm^{-3}]
n-side clad	350	0.70	Si: 1.0×10^{19}
n-side core	50	0.63	-
well	9	0.40	-
p-side core	50	0.63	-
PD1	320	1.0 \rightarrow 0.7	-
PD2	70	0.7 \rightarrow 0	Mg: 1.0×10^{20}
p-GaN	10	0	Mg: 1.0×10^{20}

閾値電流密度を計算するため、シミュレーション計算により、ゲインの電流密度依存性を、導波路解析により、光閉じ込め係数と内部損失の計算を行う。

図 2-1 に電流密度ごとのゲインスペクトルのシミュレーション結果を、図 2-2 にピークゲインの電流密度依存性のシミュレーション結果を示す。図 2-1 に示すように、各電流密度についてゲインスペクトルの計算を行い、ここからピークトップの値を抜き出すことで、ゲインの電流密度依存性を算出した。図 2-2 により、電流密度が 10 kA/cm^2 程度から正の利得が得られることが確認される。

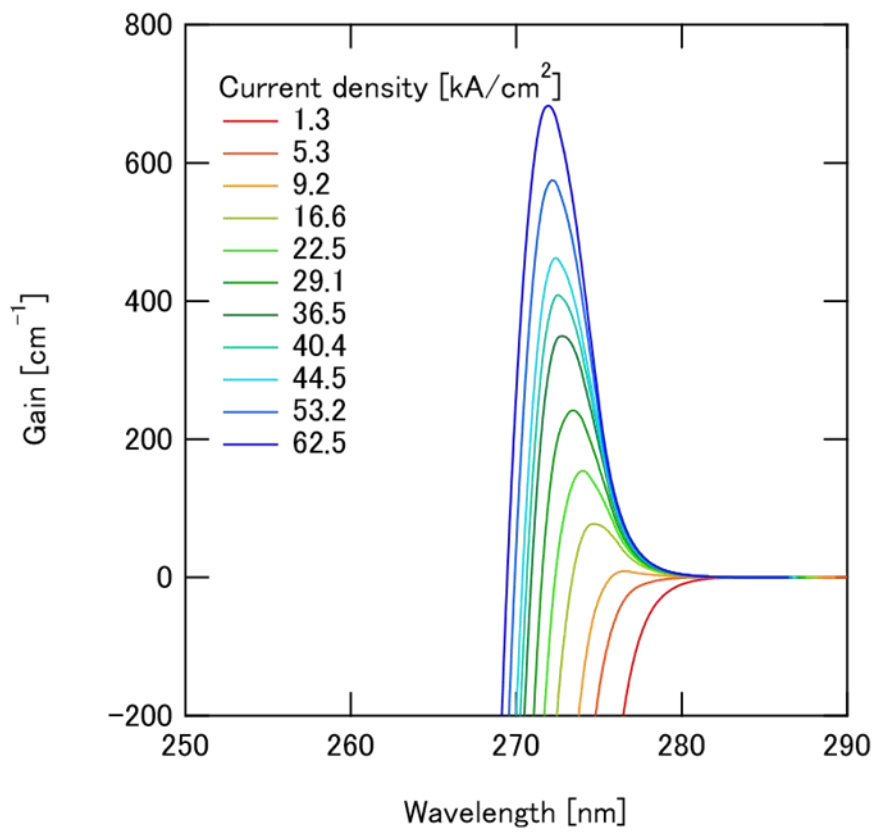


図 2-1 電流密度ごとのゲインスペクトルのシミュレーション結果

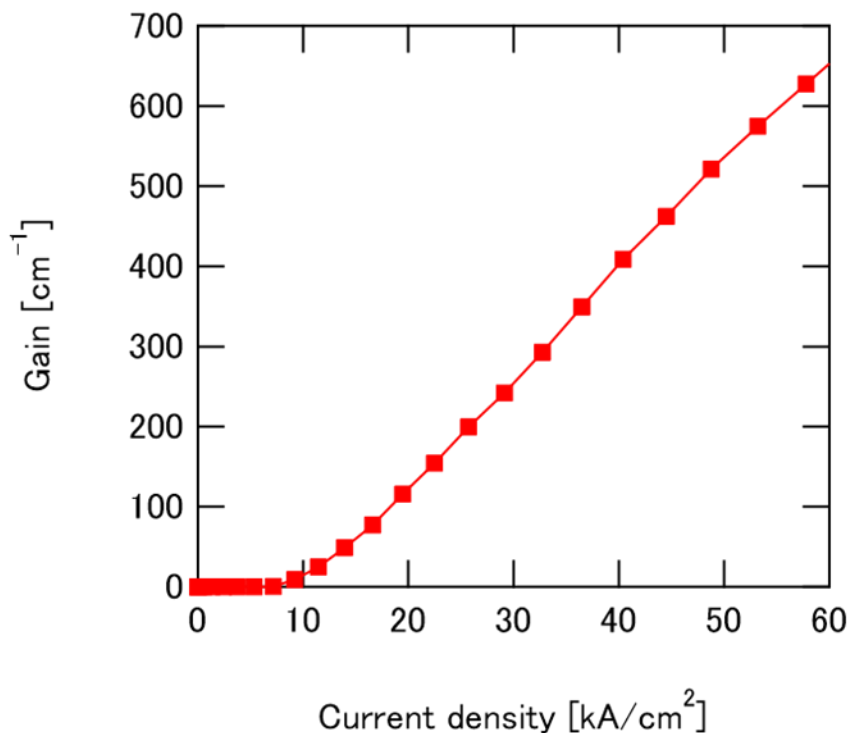


図 2-2 ピークゲインの電流密度依存性のシミュレーション結果

続いて、導波路解析の結果を示す。図 2-3 に屈折率分布と光強度分布の計算値を示す。導波路解析の結果、4.9%の光閉じ込め係数の計算値が得られた。

また、先に述べたように p 側クラッド層(PD1)より表面側の層(PD2、p-GaN)は所望の発光に対し吸収層となる。したがって、光強度分布と吸収層の重なりを小さくし、内部損失を抑制する必要がある。そこで、図 2-4 に光強度分布と 30 kA/cm²における吸収係数分布を示す。吸収係数分布については、バンド間遷移による光吸収、Mg による光吸収、自由キャリア吸収、転位による散乱損失について考慮している。なお、活性層におけるバンド間遷移による吸収、自由キャリア吸収の影響は除いている。導波路解析の結果、30 kA/cm²における内部損失の計算値として、7.5 cm⁻¹の値が得られた。本計算では、AlN 単結晶基板の成長を想定し、転位密度を 1.0×10⁴ cm⁻²としている。転位密度が非常に小さいため、計算上、転位による散乱損失の影響は無視し得る。したがって、図 2-4 における内部損失の主要因はバンド間遷移による光吸収、Mg による光吸収、自由キャリア吸収となっている。それぞれについて順に見ていく。

PD2 においてバンド間遷移による光吸収が生じるため、その位置において吸収係数が大きく増加していることが確認される。なお、光強度分布と吸収層の重なりは無視し得る程度となっているため、バンド間遷移による光吸収の内部損失への影響は無視し得ることが分かる。また、Mg ドーピングは吸収層(PD2)から行われているため、同じ理由によって、Mg ドーピングによる内部損失の増加も十分抑制されていることが確認される。したがって、不

純物ドーピングを用いない分極ドーピング構造は、光閉じ込め、内部損失の低減の両面において有用な手立てであることが確認される。以上より、本計算で得られた 7.5 cm^{-1} の内部損失の計算値は主に自由キャリア吸収に由来するものである。

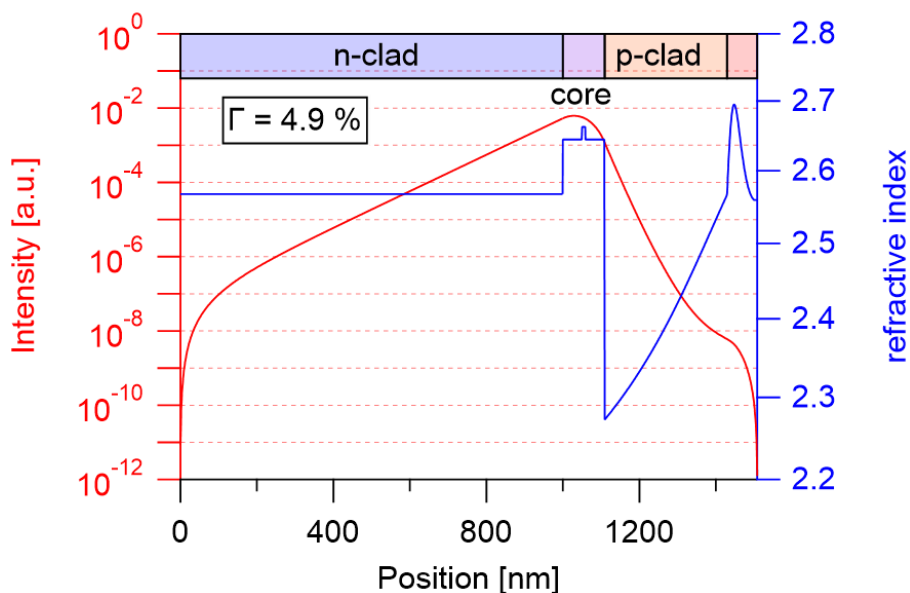


図 2-3 屈折率分布と光強度分布の計算値

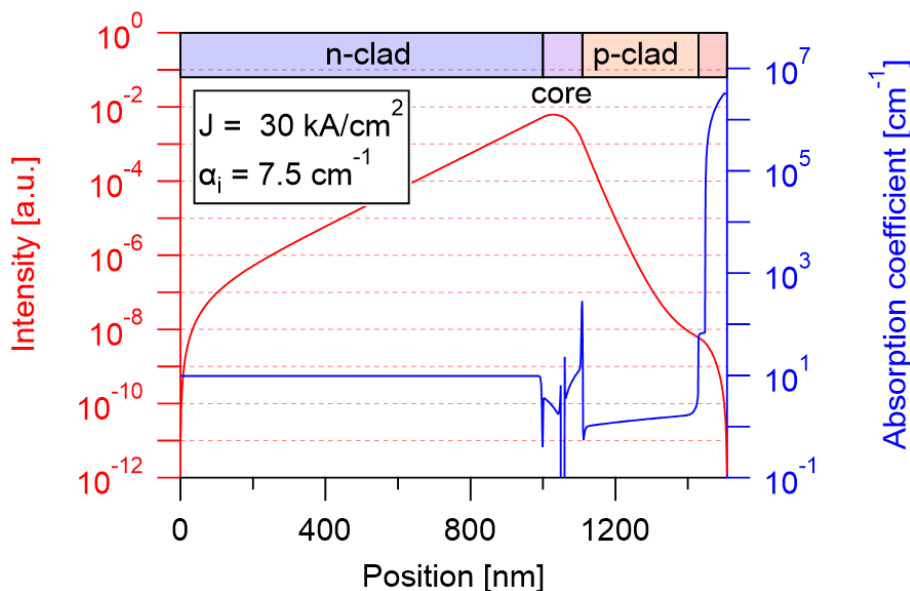


図 2-4 光強度分布と吸収係数分布

図 2-4 に示した内部損失の計算を電流密度ごとに行った結果を図 2-5 に示す。ここで考

慮している内部損失の要因として、電流密度に依存するのは自由キャリア吸収のみである。電流密度の増加に伴い、光閉じ込め層であるコア層のキャリア密度が増加するため、電流密度の増加に伴い内部損失が増加する結果となっている。

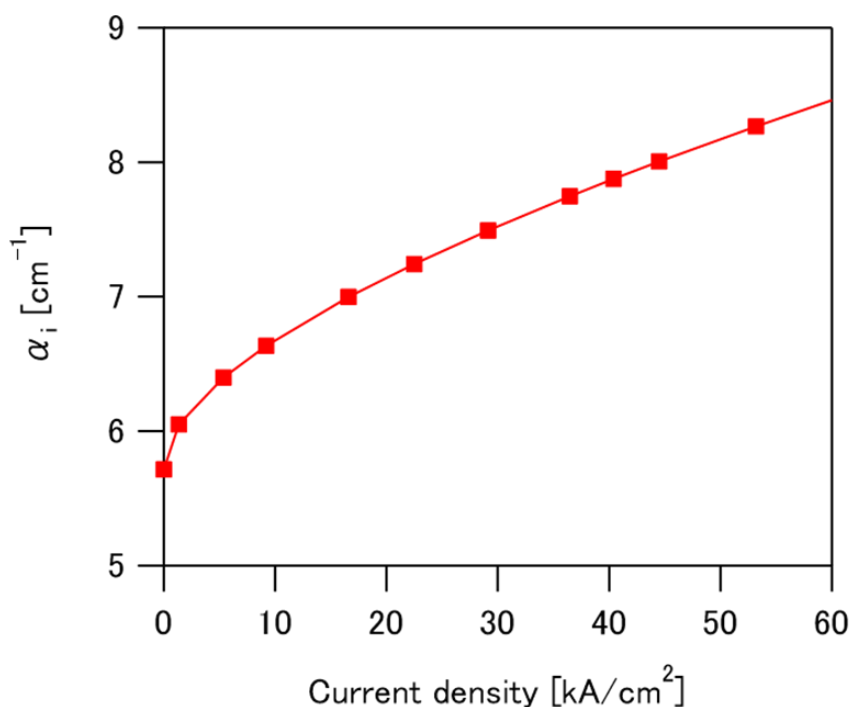


図 2-5 内部損失の電流密度依存性の計算結果

以上の計算により、ゲインの電流密度依存性、光閉じ込め係数、内部損失の電流密度依存性の計算結果が得られた。これらの値を用いて算出したネットモード利得の電流密度依存性を図 2-6 に示す。黒の破線は文献の共振器構造におけるミラー損失の計算値を示す。ミラー損失は両端面の反射率を 90 %、共振器長を 400 μm として次式を用いて計算した。

$$\alpha_m = -\frac{1}{2L} \ln(R_1 R_2) \quad (2-13)$$

ここで、 α_m はミラー損失、 L は共振器長、 R は端面の反射率である。上式の計算の結果、ミラー損失の計算値は 2.6 cm^{-1} となった。

ネットモード利得とミラー損失が等しくなることがレーザー発振の条件である。このときの閾値電流密度の計算値は 26.1 kA/cm^2 となった。文献の閾値電流密度の報告値は 25 kA/cm^2 である。したがって、本手法による計算値と文献の報告値が比較的良好に一致することが確認された。

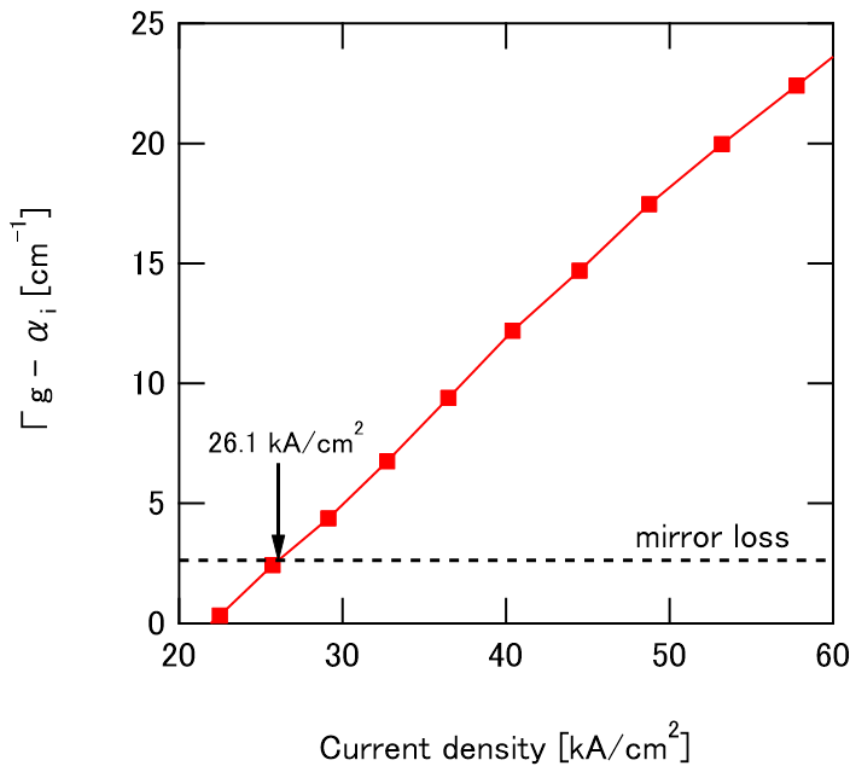


図 2-6 ネットモード利得の電流密度依存性の計算結果

2.4. 転位密度依存性

以降、本計算手法を用いて、各種依存性についての検討を行う。

まず、利得・内部損失について大きな影響を与えることが予想されている転位密度について検討する。

AlN単結晶基板を用いることで極めて高品質なAlGaIn結晶を成長することが可能である。しかし、一般的に使用されるサファイア基板と比較して、AlN単結晶基板はコスト面において大きなデメリットを抱えている。ここでは転位密度がLD特性に与える影響について定量的に検討することで、LDの実現に求められる結晶品質を推定する。また、これによって、サファイア基板上での深紫外LDの実現可能性について調査する。

シミュレーション計算には妥当性の検証において用いた表 2-3 の構造を用いた。このとき、転位密度の値のみを変化させた種々のLD構造においてシミュレーション計算を実施し、転位密度の影響について調べた。今回の計算に使用した転位密度の値を表 2-4 にまとめる。転位密度の値としては、AlN単結晶基板上の成長を想定した $1.0 \times 10^4 \text{ cm}^{-2}$ から、サファイア基板上の成長を想定した $9.0 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ の範囲で計算を行った。

表 2-4 シミュレーション計算に用いた転位密度

Sample	Dislocation density [cm^{-2}]
1	1.0×10^4
2	1.0×10^7
3	1.0×10^8
4	1.0×10^9
5	3.0×10^9
6	6.0×10^9
7	9.0×10^9

図 2-7 にシミュレーション計算により得られた利得の電流密度依存性の結果を示す。また、図 2-8 に 30 kA/cm^2 における利得の計算値を示す(図 2-7 の破線位置)。シミュレーション計算より、転位密度が $1.0 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ 以上のとき利得が著しく低下していくことが分かる。したがって、利得の観点からは、転位密度が $1.0 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ 以下の AlGaIn 結晶の成長が望ましいと考えられる。

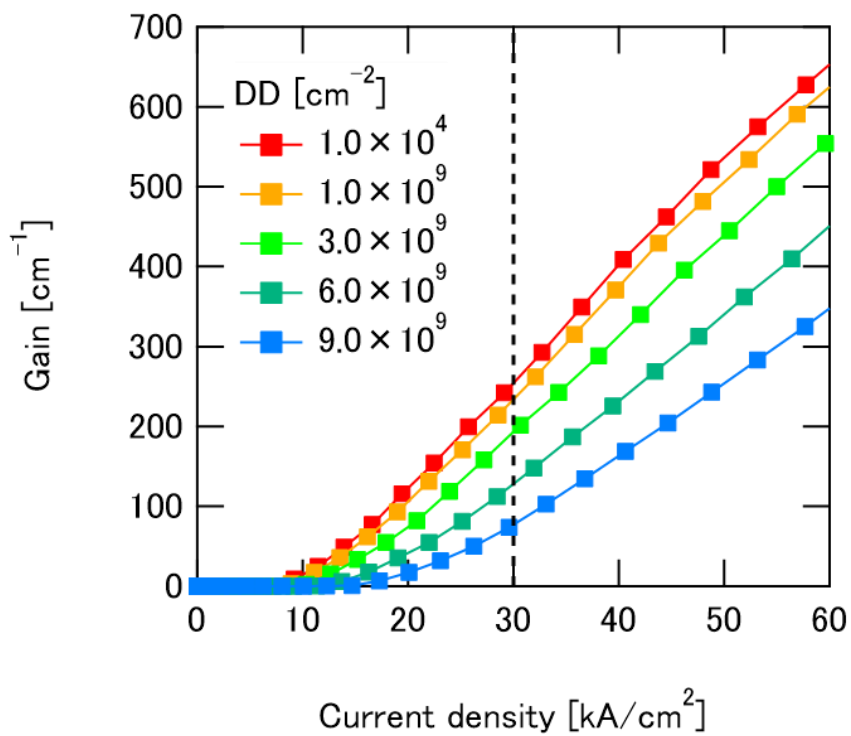


図 2-7 利得の電流密度依存性のシミュレーション結果

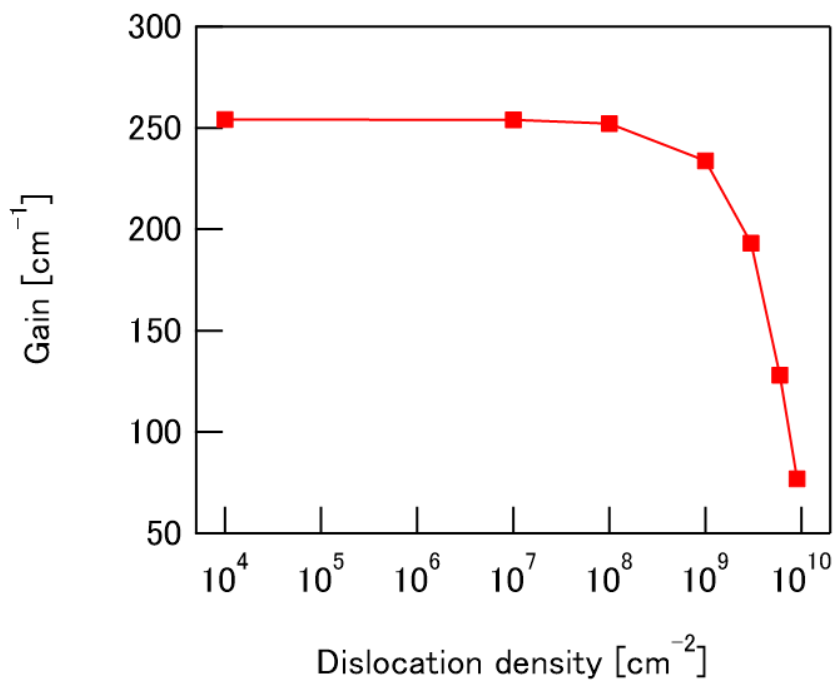


図 2-8 30 kA/cm²における利得の転位密度依存性の計算値

続いて、転位が内部損失に与える影響について検討する。図 2-9 にシミュレーション計算により得られた内部損失の電流密度依存性の結果を示す。また、図 2-10 に 30 kA/cm²における内部損失の計算値を示す(図 2-9 の破線位置)。利得の転位密度依存性と同様に、転位密度が $1.0 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ 以上のとき内部損失が著しく増加していく結果となった。したがって、利得、及び、内部損失の両観点から、転位密度を $1.0 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ 以下に抑えることが重要であることが分かる。

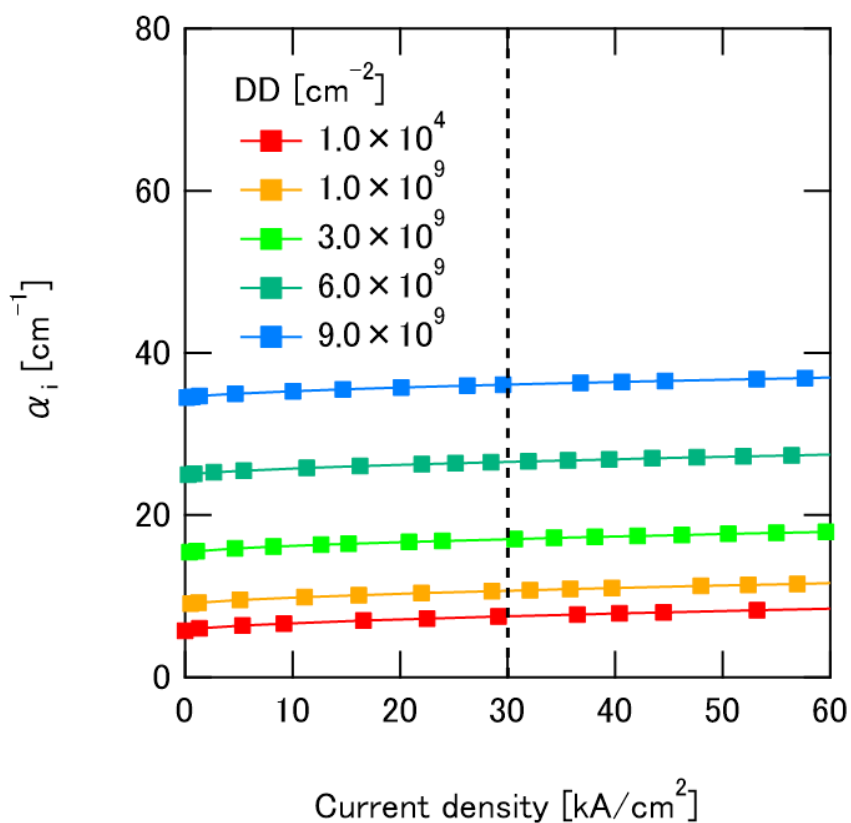


図 2-9 内部損失の電流密度依存性のシミュレーション結果

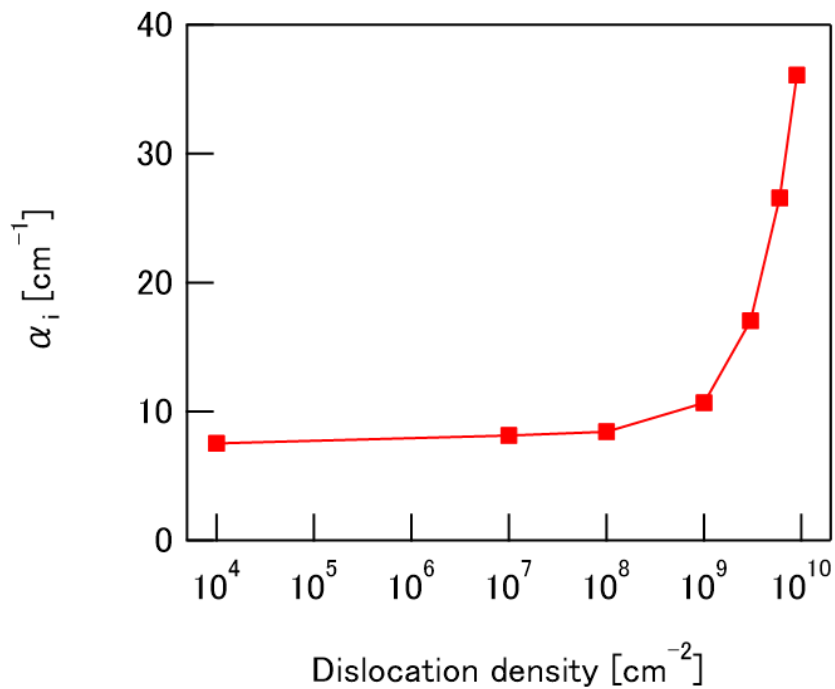


図 2-10 30 kA/cm²における内部損失の計算値

最後、ネットモード利得の電流密度依存性、及び、30 kA/cm²におけるネットモード利得の計算値を図 2-11、図 2-12 にそれぞれ示す。先に確認したように、転位は利得の低下、内部損失の増加を引き起こすため、ネットモード利得は転位密度の増加に伴い減少していく。本計算では、転位密度が $1.0 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ 以上になるとネットモード利得が著しく減少するという結果になった。また、転位密度が $1.0 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ より高くなると 30 kA/cm² の電流密度においては正のネットモード利得は確認されなかった。これより、深紫外 LD の開発・発展において、低転位の高品質 AlGaIn 結晶の成長が重要な課題であることが分かる。同時に、転位密度が $1.0 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ 以下の高品質 AlN 仮想基板を用いることで、サファイア基板上の AlGaIn 結晶成長においてもレーザ発振の実現可能性があることが示された。

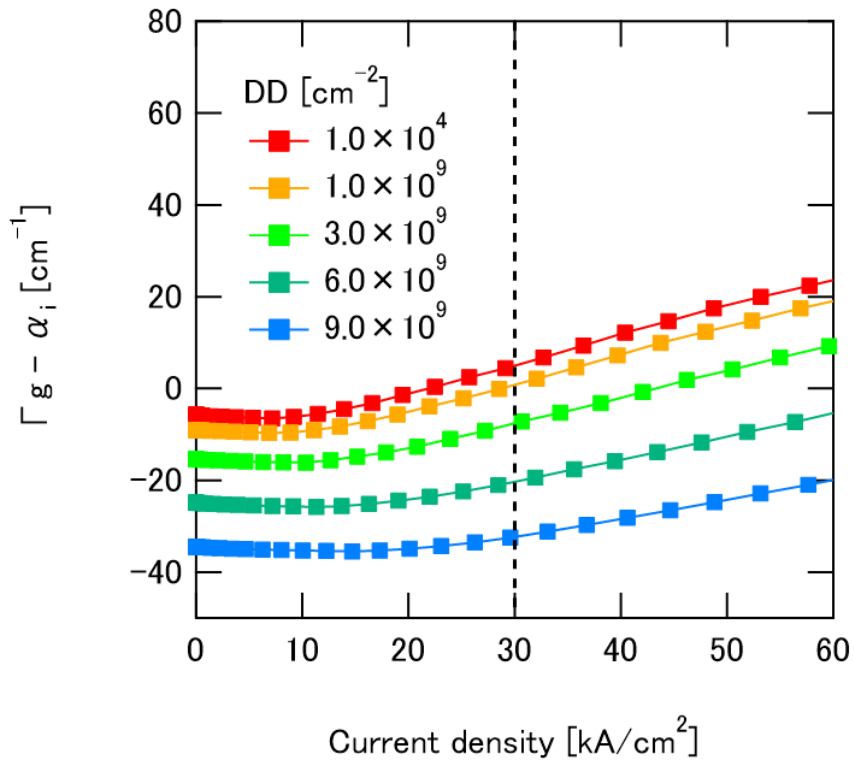


図 2-11 ネットモード利得の電流密度依存性のシミュレーション結果

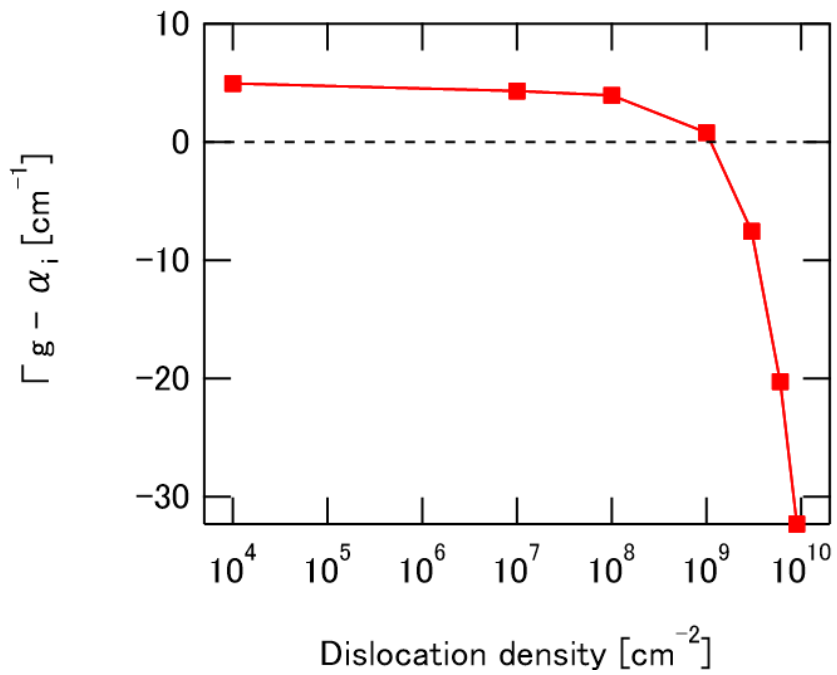


図 2-12 30 kA/cm²におけるネットモード利得の計算値

2.5. 井戸構造依存性

続いて、LD 特性の井戸構造依存性について検討する。

巨大な分極を有する AlGaIn 系発光デバイスでは、2 nm 程度の薄い量子井戸構造が用いられることが一般的である。これは、分極によって量子井戸に誘起される巨大な内部電界によって生じる電子と正孔の空間的分離を抑制するためである。なお、レーザ発振の報告されている UVC-LD、UVB-LD では、9 nm の単一量子井戸、4 nm の二周期の量子井戸構造がそれぞれ使われており、比較的幅広な井戸構造が用いられている。

井戸構造のパラメータとしては井戸層、バリア層のそれぞれの Al 組成と膜厚、周期数がある。ここでは、条件を簡単にするため、単一量子井戸構造の膜厚依存性について検討する。表 2-5 に本計算に用いたシミュレーション構造を、図 2-13 にシミュレーション構造の Al 組成プロファイルを示す。ここでは、コア層と井戸層の合計膜厚を 136 nm に固定した条件で、LD 特性の井戸幅依存性について検討を行った。井戸膜厚は 1、2、3、4、6、9、12 nm の 7 通りで計算を実施した。

表 2-5 シミュレーション構造

Layer	Thickness [nm]	Al content	Doping [cm^{-3}]
n-side clad	350	0.70	Si: 1.0×10^{19}
n-side core	68-x/2	0.55	-
well	x	0.40	-
p-side core	68-x/2	0.55	-
PD1	320	1.0 \rightarrow 0.7	-
PD2	70	0.7 \rightarrow 0	Mg: 1.0×10^{20}
p-GaN	10	0	Mg: 1.0×10^{20}

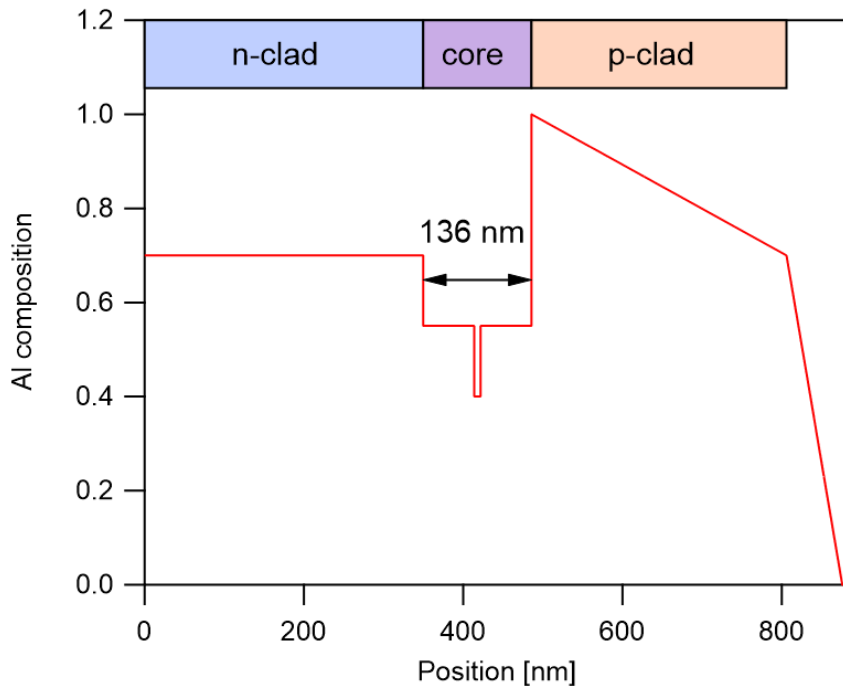


図 2-13 シミュレーション構造の Al 組成プロファイル

図 2-14 に利得の電流密度依存性のシミュレーション結果を示す。図より、量子井戸膜厚に依存して、透明電流密度(J_0)、勾配が複雑に変化していることが分かる。これより、量子井戸膜厚の選択が LD 特性において非常に重要なパラメーターであることが分かる。また、量子井戸膜厚が 1 nm のときは正の利得は確認されなかった。

図 2-14 に見られる複雑な振る舞いについて理解するため、主要なパラメーターを図 2-15 にまとめた。図 2-15 には 30 kA/cm² における利得、30 kA/cm² におけるキャリア注入効率 (CIE)、透明電流密度(J_0)、微分利得を示している。

30 kA/cm² における利得は、量子井戸膜厚の減少に伴い増加し、量子井戸膜厚が 3 nm のときに最大の値を示した。なお、量子井戸膜厚が 3 nm を下回ると利得は減少し、量子井戸膜厚が 1 nm のときは正の利得は確認されなかった。

量子井戸膜厚の減少に伴う利得の増加は主に次の二点に由来する。第一に、量子井戸膜厚の減少に伴い、活性層のキャリア密度が増加すること。第二に、量子井戸膜厚の減少に伴い、分極による電子と正孔の波動関数の空間的分離が抑制されること [52–56]。

まず、第一の点について述べる。キャリア密度 n 、光子密度 U の時間変化は次式で与えられる。

$$\frac{dn}{dt} = \frac{\eta J}{ed} - G(n - n_0)U - \frac{n}{\tau_s} \quad (2-14)$$

$$\frac{dU}{dt} = -\frac{U}{\tau_p} + G(n - n_0)U + \frac{Cn}{\tau_s} \quad (2-15)$$

ここで、 d は活性層膜厚、 η は注入効率、 J は電流密度、 G は利得係数、 n_0 は透明キャリア密度、 τ_s はキャリア寿命、 τ_p は光子寿命、 C は自然放出係数である。

自然放出光のレーザ光への混入を無視すると($C=0$)、未発振状態におけるキャリア密度は次式で与えられる。

$$n = \frac{\tau_s J}{ed} \eta \quad (2-16)$$

上式よりキャリア密度は $1/d$ に比例する。また、上式から明らかなように、透明キャリア密度を与える透明電流密度 J_0 は、

$$J_0 = \frac{edn_0}{\tau_s \eta} \quad (2-17)$$

である。したがって、透明電流密度は井戸幅に比例する。図 2-15 より、井戸幅が 4nm 以上のときは、透明電流密度は井戸幅におおよそ比例しており、前述の傾向に従っていることが確認される。なお、井戸幅が 4nm を下回ると、キャリアのオーバーフロー(注入効率の低下)が顕著になるため、透明電流密度は増加する。

続いて、第二の点である分極の影響について述べる。図 2-15 より、微分利得は量子井戸膜厚の減少に伴い増加しており、量子井戸膜厚が 6nm を下回ると、その効果はより顕著になっている。量子井戸膜厚が $12, 2\text{nm}$ のときのそれぞれの微分利得は 6.4×10^{-17} 、 $2.1 \times 10^{-16} \text{cm}^2$ となっており、井戸幅を薄くすることで微分利得は3倍以上に増加している。したがって、井戸幅が小さいほど、高いキャリア密度が得やすく、かつ、キャリア密度の増分に対する利得の増分も大きくなっている。ここで確認される微分利得の増加は、分極による電子と正孔の波動関数の空間的分離が抑制されたためである。

一般に、LD に用いられる量子井戸構造は、第一サブバンドのみにキャリアが注入されるように構造設計を行う。しかし、巨大な分極を有する AlGaIn 系量子井戸構造においては、分極の影響により、電子と正孔の第一サブバンド間の重なり積分が小さくなる。この結果、最もキャリア密度の高い第一サブバンド間の発光への寄与は小さくなり、高次のサブバンドが発光に寄与するようになる。これにより、利得スペクトルが幅広になり、ピークトップの値が減少することが予測される。

分極の影響について調べるため、量子井戸膜厚が $3, 12\text{nm}$ のときの各サブバンドの発光

への寄与を比較する。量子井戸膜厚が 3.0 nm のときは、主な発光遷移は第一サブバンドの電子(E_1)と第一サブバンドの重い正孔(HH_1)によるものであり、 E_1 - HH_1 遷移の発光強度が全体の 77% を占めている。これに対し、量子井戸膜厚が 12 nm のときは、 E_1 - HH_1 遷移の発光への寄与は全体の 2.6% しかない。図 2-16 に量子井戸膜厚が 12.0 nm のときの重い正孔のサブバンドごとのキャリア密度と重なり積分を示す。ここで、重なり積分は E_1 - HH_1 間の重なり積分を示している。量子井戸膜厚が 12.0 nm のときは、最もキャリア密度の高い E_1 、 HH_1 の重なり積分の値は小さく、主要な発光遷移は E_1 - HH_2 遷移となっている。しかし、 E_1 - HH_2 間の発光遷移も全体の発光強度の 26% しか占めておらず、多数のサブバンドが発光に寄与する形となっている。図 2-16 の挿入図は各サブバンドの発光スペクトルへの寄与を示している。多数のサブバンドが発光再結合に寄与することにより、利得スペクトルは幅広になり、そのピークトップは減少する。したがって、分極の観点からも適切な井戸幅の選択が重要であることが確認される。また、井戸幅の狭い量子井戸構造と比較して、サブバンド間のエネルギー差が小さく、より多くのサブバンドにキャリアが充填されるようになっていることも微分利得の減少の一因であると考えられる。

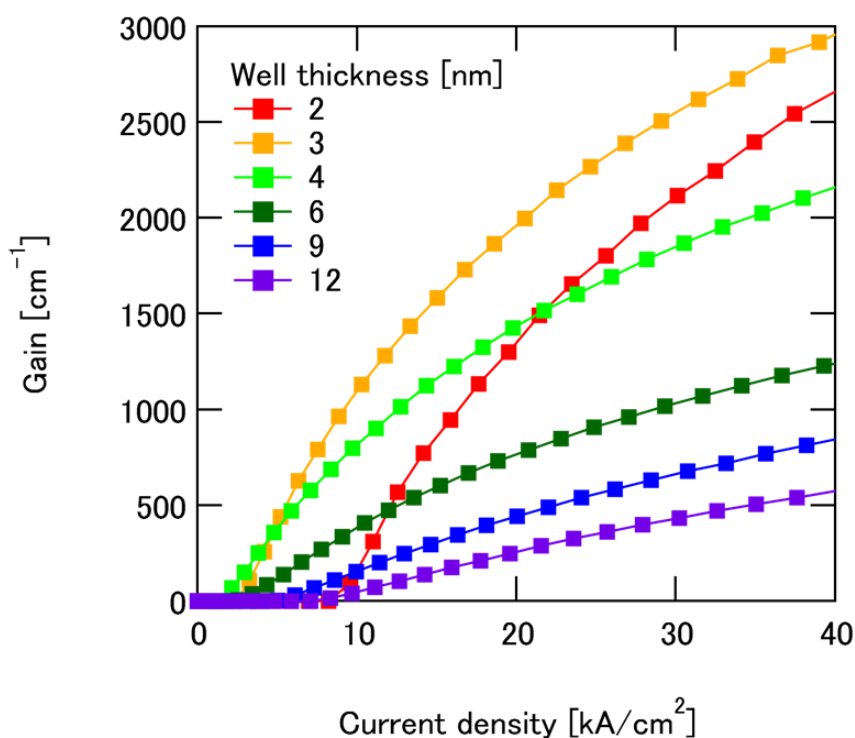


図 2-14 利得の電流密度依存性のシミュレーション結果

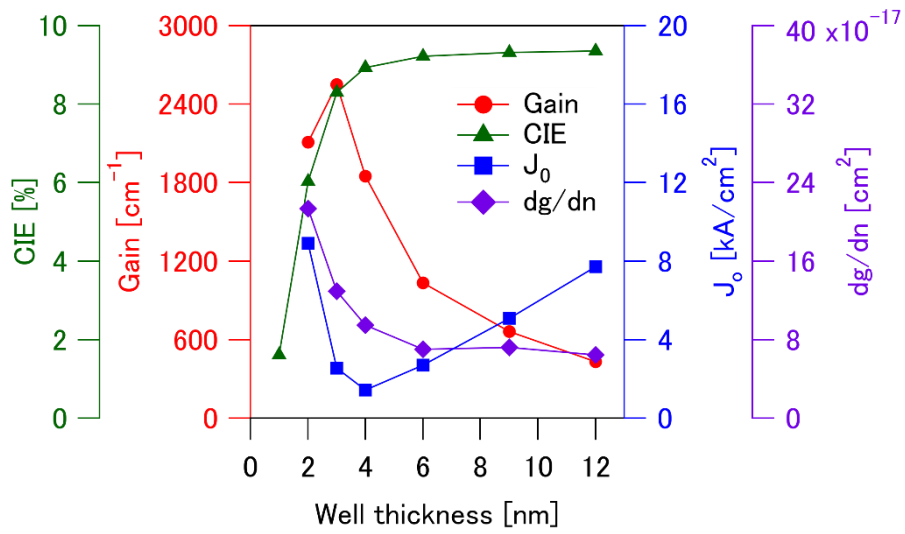


図 2-15 30 kA/cm²における利得、30 kA/cm²における注入効率、透明電流密度 J₀、及び、微分利得 dg/dn の井戸幅依存性

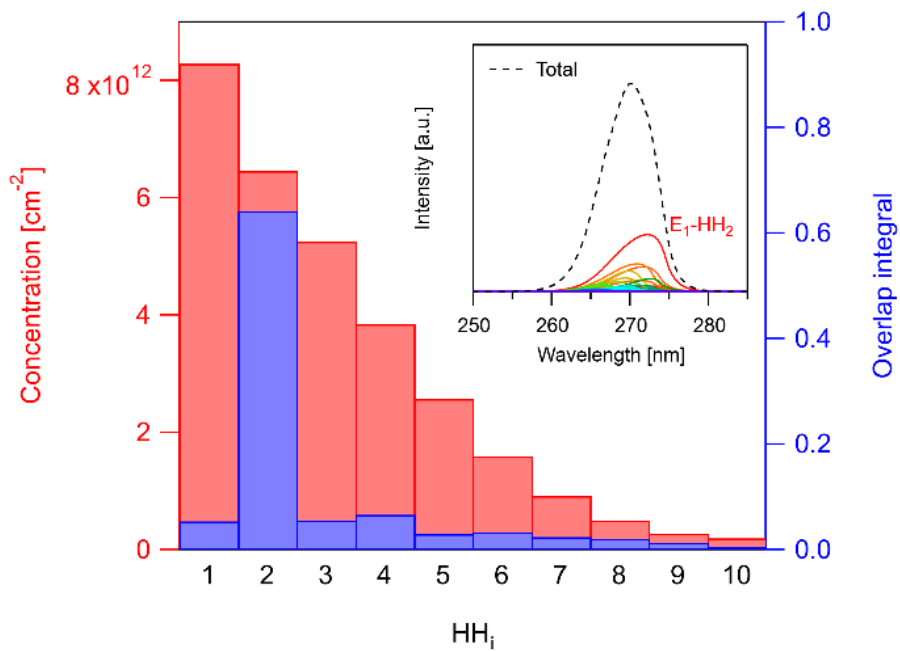


図 2-16 12.0-nm SQW 構造における各サブバンド HH_i におけるキャリア密度と、HH_i-E1 の重なり積分値。挿入図は各サブバンドの発光スペクトル。

最後にネットモード利得の比較を行った。図 2-17 に 30 kA/cm²におけるネットモード利

得を示す。30 kA/cm²におけるネットモード利得の値は量子井戸膜厚が 2、3、4、6、9、12 nm の順に、-5、37、41、35、34、28 cm⁻¹であった。光閉じ込め係数、内部損失も考慮したネットモード利得については、量子井戸膜厚が 4 nm のときに最大の値が得られた。これは光閉じ込め係数が量子井戸膜厚に比例して増加するためである。

以上を踏まえると、最適な量子井戸構造は次のように考えることができる。量子井戸膜厚は、微分利得を高めるため、キャリアのオーバーフローが生じる量子井戸膜厚を下限として、可能な限り薄い量子井戸膜厚が良い。また、周期数 M の多重量子井戸構造においては、透明電流密度は M 倍に増加するが、光閉じ込め係数と第一サブバンドに収容できるキャリア数は M 倍になる。これらを考慮して、適切な周期数を選択することで閾値電流密度を小さくすることが可能である。このときの最適な周期数はミラー損失の値に依存する。

続く計算では、高いネットモード利得の計算値が得られた井戸幅 4 nm、周期数 2 の条件を用いる。

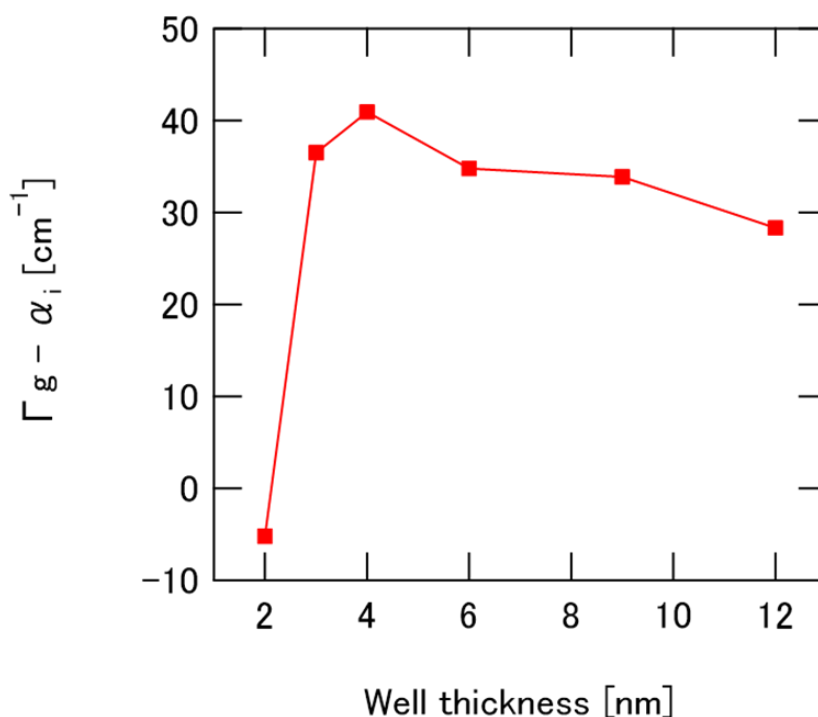


図 2-17 30 kA/cm²におけるネットモード利得の計算値

2.6. コア層 Al 組成依存性

続いて、コア層の Al 組成依存性についての計算結果を示す。計算は波長 270 nm の LD 構

造について行った。ここでは、コア層とバリア層の Al 組成を一律に変化させた構造について計算を行い、コア層 Al 組成が LD 特性に与える影響について調べた。表 2-6 に計算に用いたシミュレーション構造を、図 2-18 にシミュレーション構造の Al 組成プロファイルを示す。

表 2-6 シミュレーション構造

Layer	Thickness [nm]	Al content	Doping [cm^{-3}]
n-clad	350	0.70	Si: 1.0×10^{19}
n-core	60	x	-
2×well	4	0.40	-
barrier	6	x	-
p-core	60	x	-
PD1	320	1.0 -> 0.7	-
PD2	70	0.7 -> 0	Mg: 1.0×10^{20}
p-GaN	10	0	Mg: 1.0×10^{20}

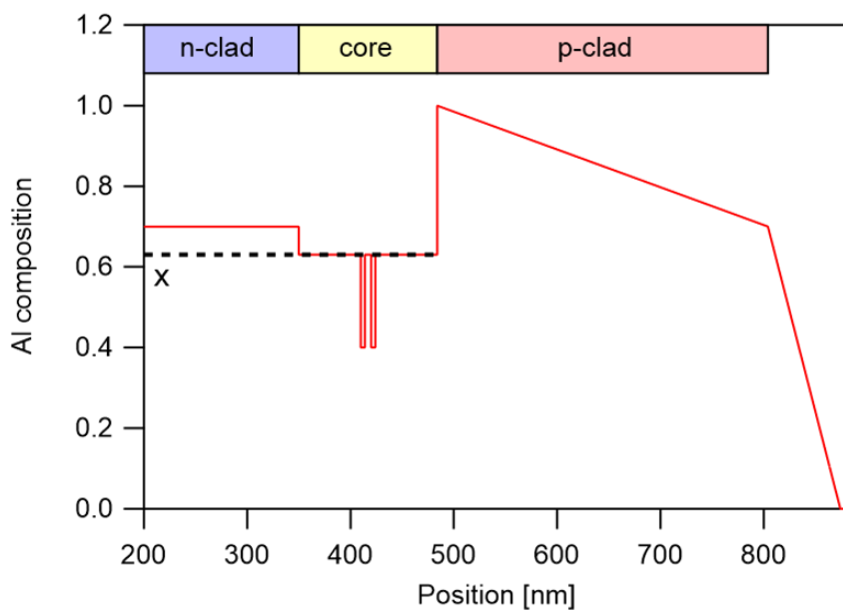


図 2-18 シミュレーション構造の Al 組成プロファイル

図 2-19 に利得の電流密度依存性のシミュレーション結果を、図 2-20 に 30 kA/cm²における利得のコア層 Al 組成依存性を示す。利得はコア層の Al 組成に対し最適値を有し、コア層の Al 組成が 0.50 のときに最大の値を示した。

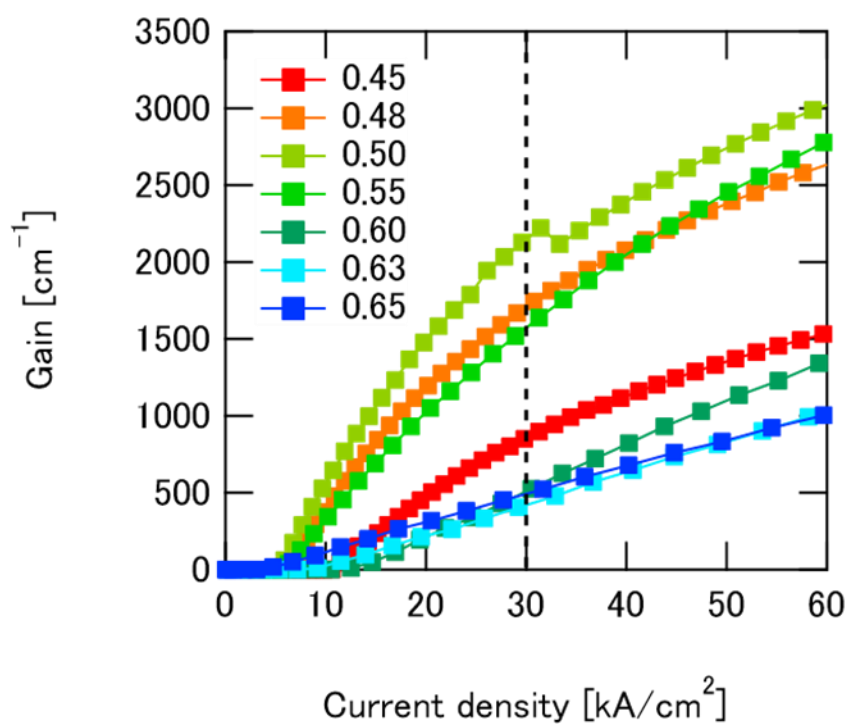


図 2-19 利得の電流密度依存性のシミュレーション結果

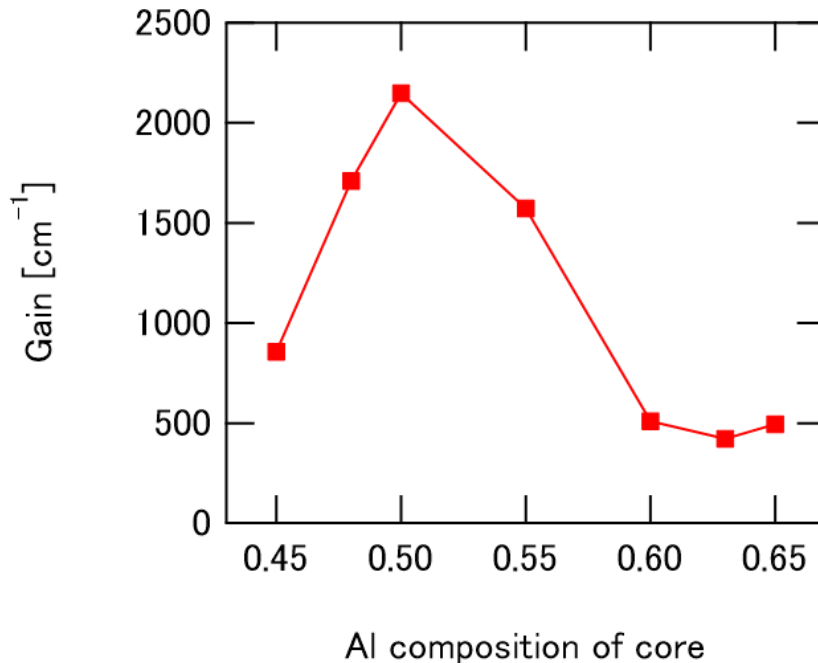


図 2-20 利得のコア層 Al 組成依存性の計算値

利得は注入効率のコア層 Al 組成依存性を反映して、コア層 Al 組成に対し最適値を有することが確認された。ここで、コア層 Al 組成が注入効率に与える影響について理解するため、電流密度を活性層での再結合電流(Jwell)、活性層以外での再結合電流(Jother)、リーク電流(Jleakage)の 3 種に分ける。30 kA/cm²におけるこれら電流密度のコア層 Al 組成依存性を図 2-21 に示す。また、量子井戸へのキャリア注入の均一性を評価するため、Jwell については、n 側、p 側の量子井戸ごとに再結合電流密度を表示した。

まず、リーク電流(Jleakage)に着目する。リーク電流はコア層 Al 組成の増加に伴い、単調に増加している。これは、コア層の Al 組成増加に伴い、コア、クラッド間の Al 組成差が小さくなり、電子ブロック層を兼ねる p 側クラッド層の電子に対する障壁高さが減少するためである。また、シミュレーション構造では p 側クラッド層の初端 Al 組成を 100 %としており、すでにクラッド層の Al 組成には上限の値を用いている。これはコア層に高 Al 組成 AlGa_xN 層を必要とする短波長 LD 構造において、リーク電流によって著しい注入効率の減少が生じることを意味している。

次に、再結合電流(Jwell、Jother)に着目する。全再結合電流(Jwell+Jother)に占める活性層での再結合電流 (Jwell) の割合はコア層 Al 組成の増加に伴い単調に増加している(図 2-22)。これは、次の二点により説明される。第一に井戸層とコア層との組成差が大きくなり、活性層へのキャリアの閉じ込めが強化されたこと。第二に、コア層の Al 組成の増加に伴い一定電流密度におけるコア層のキャリア密度が減少したこと。なお、キャリアの閉じ込めが強化

されると同時に、キャリア注入が不均一化し、p側の量子井戸で優先的にキャリアの再結合が起きるようになっていく。キャリア注入が不十分な量子井戸層は吸収層として働くため、キャリア注入の不均一性は利得の低下を引き起こす。これを回避するには、バリア層の組成、膜厚を最適化し、各井戸層への均一なキャリア注入を確保する必要がある。

第二の点についてより詳しく見る。図 2-21 に示されるように、活性層以外での再結合電流(Jother)によるキャリアの消耗によって注入効率の低下が生じている。このときの活性層以外での再結合電流は、ほぼすべてコア層で再結合している。したがって、コア層の体積(膜厚)を小さくする、コア層のキャリア密度を下げることで注入効率の改善に対し有効であることが分かる。ここでは、コア層 Al 組成の増加に伴い、コア層のキャリア密度・再結合レートが減少することで注入効率が改善している。また、コア層の再結合を抑制しつつ、高い光閉じ込めを実現できる GRINSCH 構造などもまた有効である。

以上より、これらの効果の競合により、注入効率、及び、利得はコア層の Al 組成に対し最適値を有する結果となった。

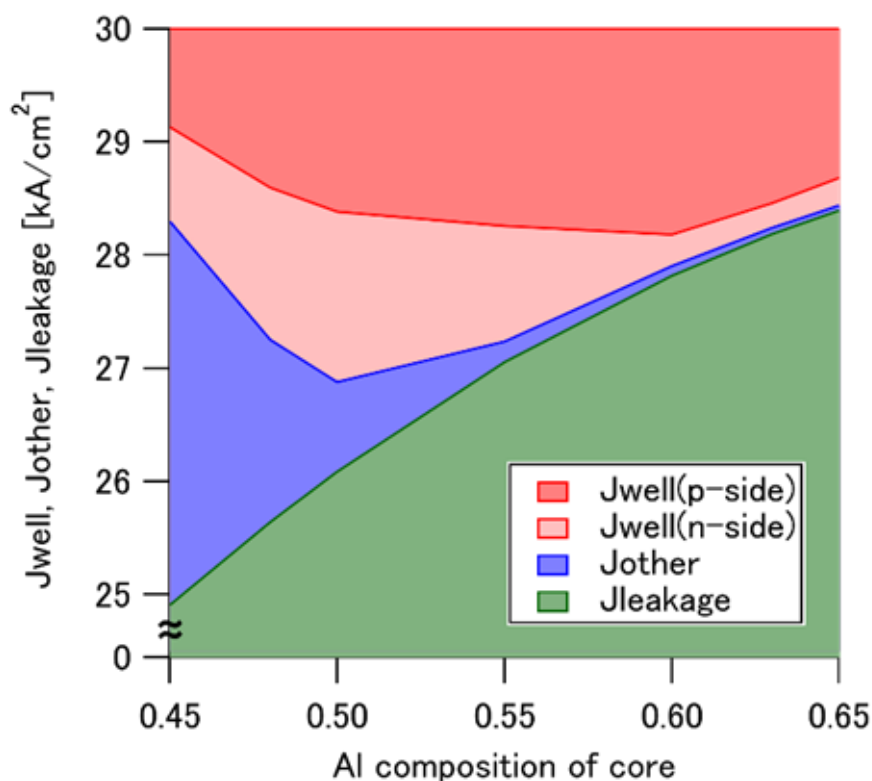


図 2-21 30 kA/cm²における Jwell、Jother、Jleakage のコア層 Al 組成依存性

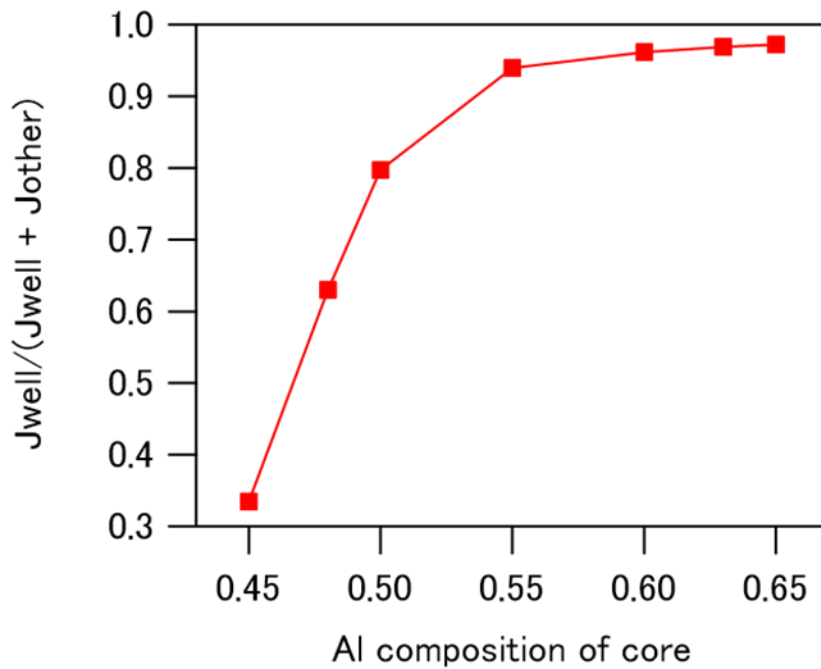


図 2-22 全再結合電流密度($J_{well} + J_{other}$)に占める活性層での再結合電流密度(J_{well})

また、コア層の Al 組成は光閉じ込め係数、内部損失に対しても大きな影響を与える。図 2-23 に光閉じ込め係数と、 30 kA/cm^2 における内部損失のコア層 Al 組成依存性を示す。十分な光閉じ込めを実現するためには、コア層とクラッド層間で十分な屈折率差を確保する必要がある。コア層 Al 組成の増加に伴い、クラッド層との屈折率差が減少するため、光閉じ込め係数は減少する。ここでは、コア層の Al 組成が 0.55 を超えたところから光閉じ込め係数が大きく減少する結果となった。また、コア層の Al 組成が小さいとき、コア層のキャリア密度が大きくなるため、自由キャリア吸収による内部損失が増加する。計算では、コア層の Al 組成が 0.55 を下回ったところから、内部損失が大きく増加する結果となった。

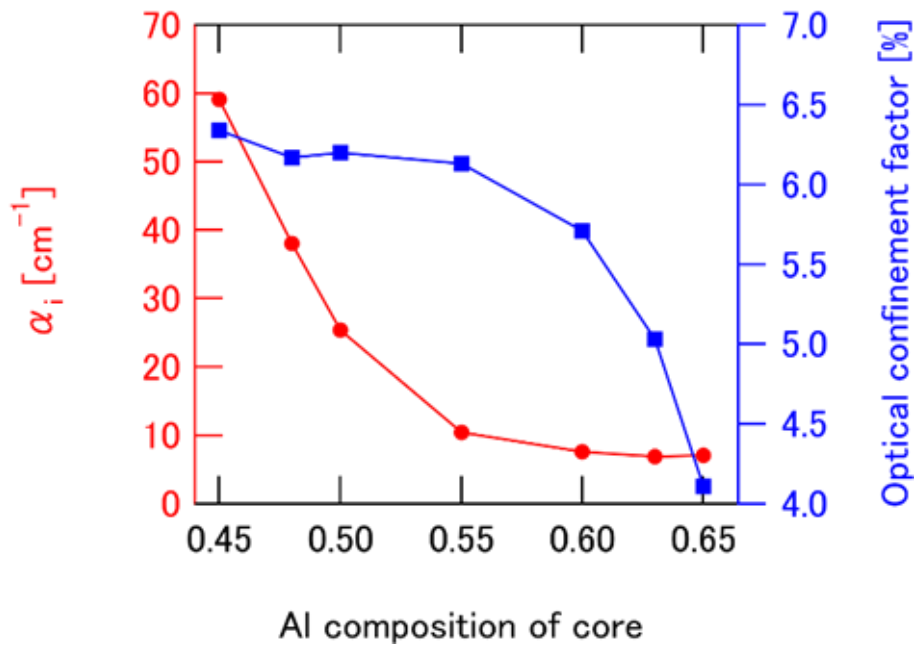


図 2-23 30 kA/cm² における光閉じ込め係数、内部損失のコア層 Al 組成依存性

最後に、ネットモード利得の電流密度依存性のシミュレーション結果を図 2-24 に、30 kA/cm² におけるネットモード利得の計算値を図 2-25 に示す。

本計算では、コア層の Al 組成が 0.50 のときに最大のネットモード利得が得られた。今回の計算で得られた最適構造において、文献[34]の共振器構造を仮定したとき、7.9 kA/cm² の比較的低い閾値電流密度の計算値が得られた。これより、コア層の Al 組成を最適化することによって閾値電流密度の低減が期待されることが示された。

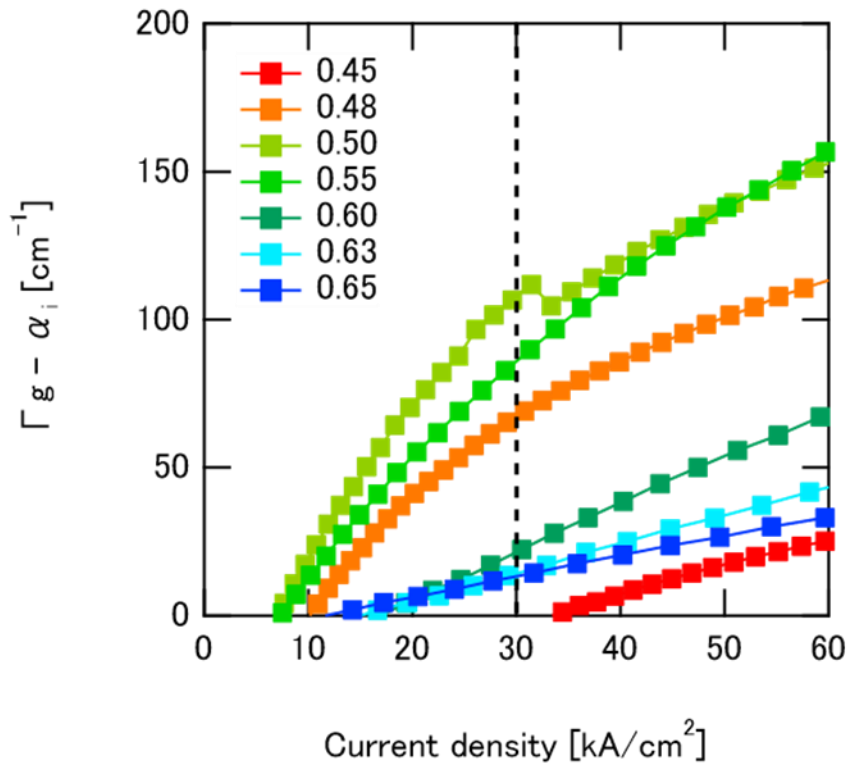


図 2-24 ネットモード利得の電流密度依存性のシミュレーション結果

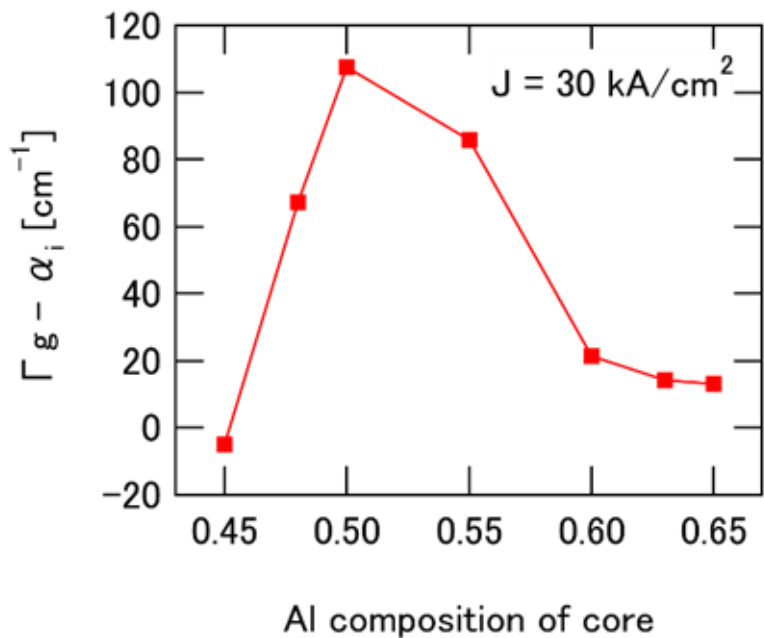


図 2-25 30 kA/cm^2 におけるネットモード利得のコア層 Al 組成依存性

第3章 EBL および Mg ドーピングの導入による注入効率の改善

3.1. 緒言

第2章で確認したように、深紫外 LD 構造におけるキャリア注入効率は低く、高い閾値電流密度の主要な要因となっている。先の計算においては、注入効率を最大化するようにコア層の Al 組成を最適化した構造においても、その注入効率の計算値は 10 %であった。実際、UVB-LD において 3.5 %の、UVC-LD において 2.3 %の注入効率の推定値が報告されている[41,57]。また、発振波長の短波長化に伴い、注入効率はさらに低下することが予想される。したがって、深紫外 LD の低閾値化、さらなる短波長 LD の実現には、注入効率の改善が極めて重要である。

本章では、p 側コア層への電子ブロック層(EBL)と Mg ドーピングの導入が注入効率を劇的に改善することが実験的に示す。さらに、シミュレーション計算を用いて、p 側コア層への Mg ドーピングによる注入効率の改善機構について検討を行う[58]。

3.2. Cp₂Mg 流量依存性

3.2.1. 実験方法

試料は MOCVD 法(太陽日酸 SR4000)を用いて成長した。成長基板には、c 面サファイア基板上に AlN を成長した AlN 仮想基板を用いた。AlN 仮想基板の典型的な転位密度は $2.0 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ である。III 族材料として、トリメチルアルミニウム(TMAI)、トリメチルガリウム(TMG)を、V 族材料として、アンモニア(NH₃)を使用した。n 型、及び、p 型のドーパント原料としては、テトラエチルシラン(TESi)、ビスシクロペンタジエニルマグネシウム(Cp₂Mg)をそれぞれ用いた。リアクタ圧力は成長全体で 10 kPa とした。

表 3-1 に試料構造を、図 3-1 に作製試料の模式図を、図 3-2 に作製試料の Al 組成プロファイルを示す。図 3-2 に示すように、p 側コア層への Mg ドーピングは EBL と p 側クラッド層に囲まれた領域に対して行った。このとき、p 側コア層への Cp₂Mg 流量のみ異なる 7 種の LD 試料を作製した。Cp₂Mg 流量は、0 から 90 sccm までとした。表 3-2 に成長試料のドーピング条件をまとめる。

作製した試料に対し、LED と同条件の処理を施し、ウェハ上で測定を実施した。

まず、作製した試料に、常圧、N₂ 雰囲気中で 850 °C、10 分の活性化アニールを施した。次いで、真空蒸着により、p 電極を形成した。p 電極としては Ni、Au を用いた。このとき、Ni、Au の厚みはそれぞれ 20 nm、100 nm とした。n 電極には In を圧着した。以上の加工を

施した後、LED と同様にして、EL スペクトル測定、電流-電圧特性、電流-光出力特性の測定を行い、注入効率の指標とした。

光出力測定には、出力が既知の 280 nm LED で校正した Si フォトダイオードを用いた。ここで得られた光出力に、同一の LED 試料のウェハ上の光出力とチップ加工後の全光束測定的光出力の比較より得られた補正係数を乗じて、チップ加工後の出力に変換した。EL スペクトル測定には、モノクロメーターと液体窒素冷却型の CCD を用いた。

表 3-1 試料構造

Layer	Thickness [nm]	Al content	Doping [sccm]
n-clad	1500	0.70	Si: 0.88
n-core	50	0.63	-
4×well	1.7	0.36	-
4×barrier	6	0.63	-
p-core1	2	0.63	-
EBL	5	0.75	-
p-core2	43	0.63	Mg: 0 - 90
PD1	360	1.0 -> 0.7	-
PD2	70	0.7 -> 0	Mg: 30
p-GaN	200	0	Mg: 100

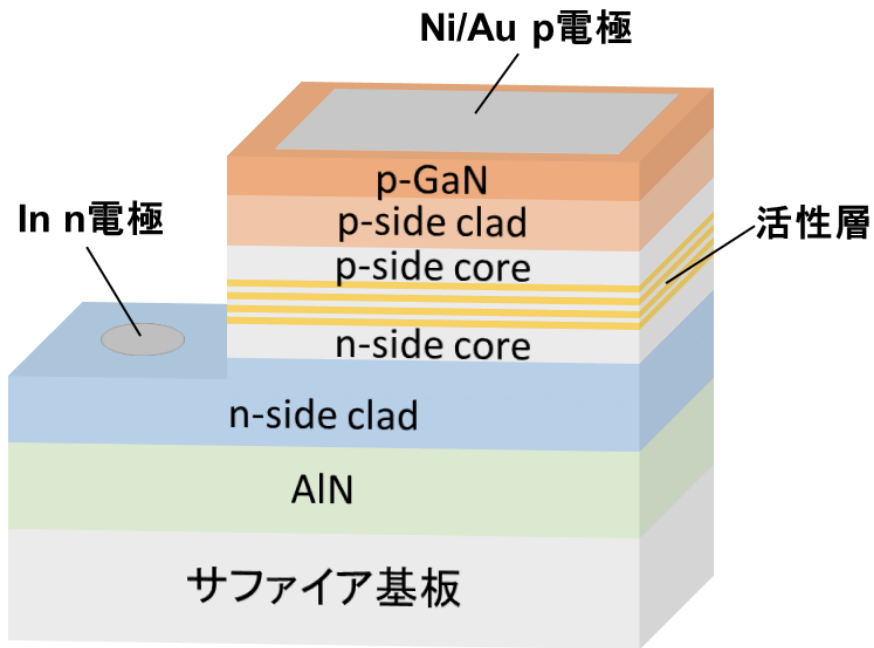


図 3-1 作製試料の模式図

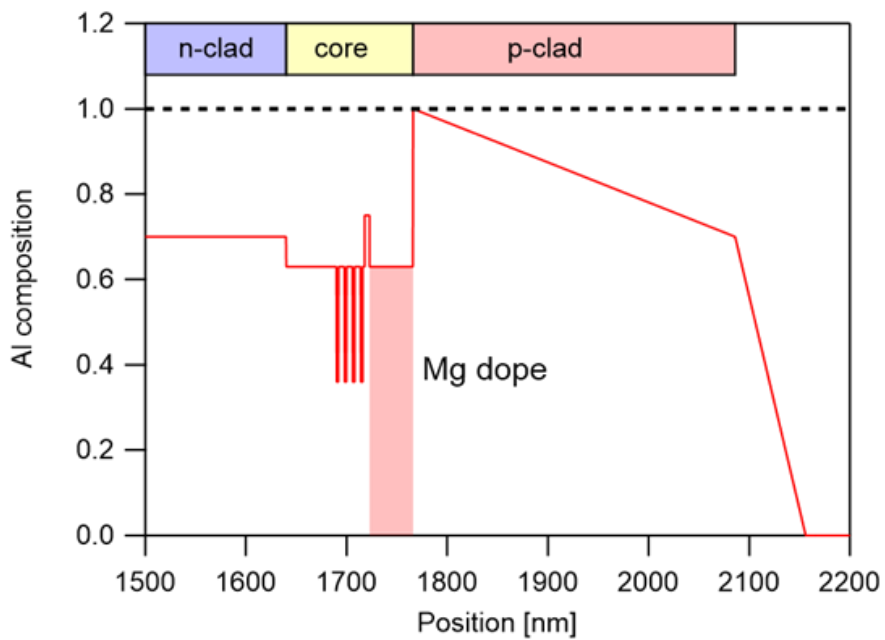


図 3-2 Al 組成プロファイル

表 3-2 作製試料の Mg ドーピング条件

Sample	Cp ₂ Mg [sccm]
--------	---------------------------

1	0
2	5
3	10
4	15
5	30
6	60
7	90

3.2.2. 結果と考察

図 3-3 に典型的な電流-EQE 特性を、図 3-4 に各試料の 100 mA における EQE をボックスプロットで示す。なお、p 側コア層の Cp_2Mg 流量が 90 sccm の試料は電極が壊れやすく、EL 特性の測定が困難であったため、図から除いている。図 3-4 に示すように、EQE は Cp_2Mg 流量に対し最適値を有し、 Cp_2Mg 流量が 10 sccm のときに最大の EQE を示した。最適値における EQE の測定値は 1.0 %程度となっており、ノンドープ試料のおよそ 10 倍の効率を示した。さらに、p 側コア層へ Mg をドーピングすることで大幅なドループ特性の改善が見られた。また、本実験では、p 側コア層の Cp_2Mg 流量のみが異なっているため、各成長試料について、およそ等しい内部量子効率、光取り出し効率が期待される。したがって、確認された EQE の顕著な変化は注入効率の増加によるものである。これより、p 側コア層への Mg ドーピングによって、注入効率が劇的に改善されることが実験的に示された。

ここで、内部量子効率を 50 %、光取り出し効率を 10 %と仮定して注入効率を見積もると、注入効率の計算値は 20 %となる。なお、ここでは注入効率を過大評価することを避けるため、内部量子効率、光取り出し効率を大きめに見積もった。ここで得た注入効率の値は、シミュレーションの計算値、UVB-LD の報告値を大きく上回る数字であり、深紫外 LD の低閾値化、及び、さらなる短波長 LD の実現において極めて有望な知見である。

注入効率は、電子ブロック層の電子に対する障壁高さに強く依存することが知られている。電子ブロック層の障壁高さは、フェルミ準位から測った電子ブロック層の高さとして定義される。ここで、一般的な LED のデバイス駆動時のバンドプロファイルを例にとり、電子に対する電子ブロック層の障壁高さ ϕ_e の物理的な意味について確認する(図 3-5)。

先のシミュレーション計算に示されるように、注入電流のおよそ 90 %は電子ブロック層を兼ねる p 側クラッド層を超えて、p 層へとオーバーフローしており、これが低い注入効率の主たる原因となっている(図 2-21)。したがって、注入効率は、主に電子ブロック層を超

える電子の密度によって決定されていることが分かる。電子ブロック層の直前のキャリア密度を n_0 とすると、 n_0 は電子ブロック層直前の伝導帯下端のエネルギー E_c 、フェルミ準位 E_f を用いて次式で表される。

$$n_0 = N_c e^{-\frac{E_c - E_f}{k_b T}} \quad (3-1)$$

ここで、 N_c は伝導帯の有効状態密度、 k_b はボルツマン定数、 T は温度である。また、簡単のため、ここではボルツマン分布を仮定した。

n_0 のうち、電子ブロック層を超えられるだけのエネルギーを有する電子密度 n_{leak} は次式で表される。

$$n_{leak} = N_c e^{-\frac{E_c - E_f}{k_b T}} \cdot e^{-\frac{E_{EBL} - E_c}{k_b T}} = N_c e^{-\frac{E_{EBL} - E_f}{k_b T}} = N_c e^{-\frac{\phi_e}{k_b T}} \quad (3-2)$$

したがって、電子ブロック層の電子に対する障壁高さ ϕ_e は、電子ブロック層を超えて、p 側へオーバーフローすることが可能なキャリア密度を特徴づけるパラメーターであることが理解される。

本実験においては、コア層への Mg ドーピングにより、電子ブロック層の電子に対する障壁高さが増加したものと推察される。

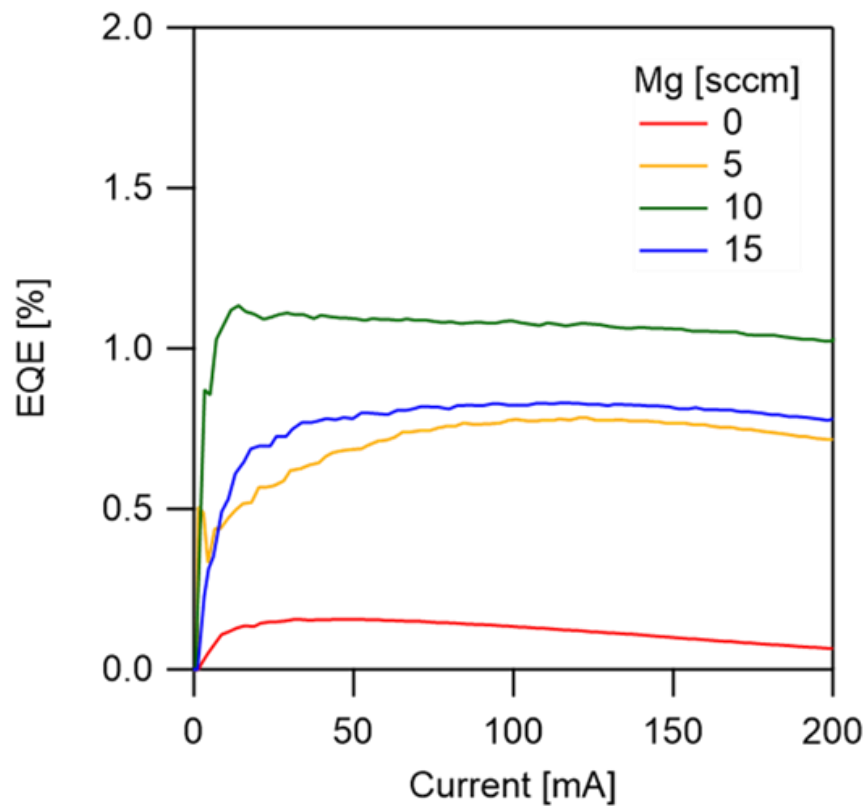


図 3-3 典型的な電流-EQE 特性

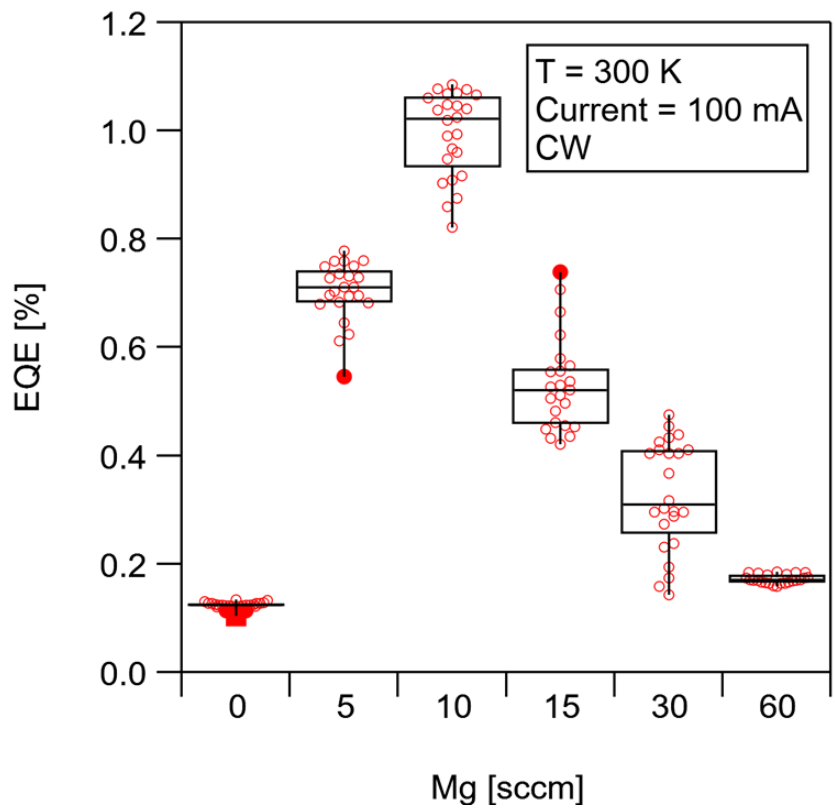


図 3-4 100 mA における EQE の p 側コア層 Cp_2Mg 流量依存性

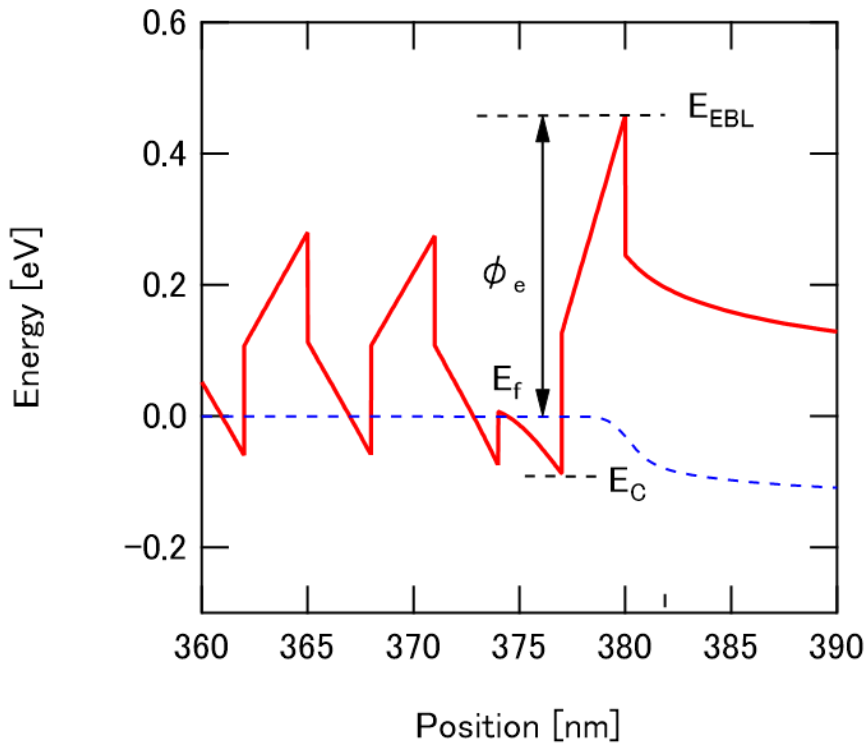


図 3-5 典型的な伝導帯バンドプロファイルと電子ブロック層の障壁高さ

Cp_2Mg 流量が 10 sccm を超えると、EQE は Cp_2Mg 流量の増加に伴い単調に減少する結果となった。これは、過剰な Mg ドーピングによる欠陥導入、自己補償の影響により、続く p 型エピタキシャル層の品質が劣化したためと考えられる[59,60]。実際、 Cp_2Mg 流量が最適値の 10 sccm を超えると、電圧は Cp_2Mg 流量の増加に伴って、増加する傾向を示した。図 3-6 に各試料の 20 mA における電圧値をボックスプロットで示す。なお、p 側コア層の Cp_2Mg 流量が 90 sccm の試料における比較的低い電圧の結果は破損した電極に由来している。

また、最も高い EQE を示した試料(Cp_2Mg 流量: 10 sccm)について、走査型透過電子顕微鏡(STEM)、二次イオン質量分析法(SIMS)を用いて構造解析を行った。図 3-7 に高角散乱環状暗視野走査透過電子顕微鏡像(HAADF-STEM)を示す。図より、各層において急峻な界面が得られていることが確認できる。また、各層の膜厚が設計通りの値となっていることが確認された。SIMS 分析より、最も高い EQE を示した試料(Cp_2Mg 流量: 10 sccm)における p 側コア層における Mg 濃度は $1.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ であった。なお、Mg の表面偏析により[61,62]、p 側コア層直上の分極ドープ p 側クラッド層において意図しない Mg の分布が確認された。分極ドープ層における Mg 濃度は Mg ドーピング領域から離れるにつれ指数関数的に減少しており、このときの Mg 濃度の減衰レートは 145 nm/decade であった。

分極ドープ層に Mg をドーピングすることにより、分極ドープ層が高抵抗化することが報告されている[63]。これは、Mg ドーピングに伴うドナー性欠陥の導入によるものと考えら

れている。Cp₂Mg 流量の増加に伴う効率の低下、及び、電圧の上昇は、分極ドープ層への Mg の拡散による電気特性の劣化によるものと考えられる。

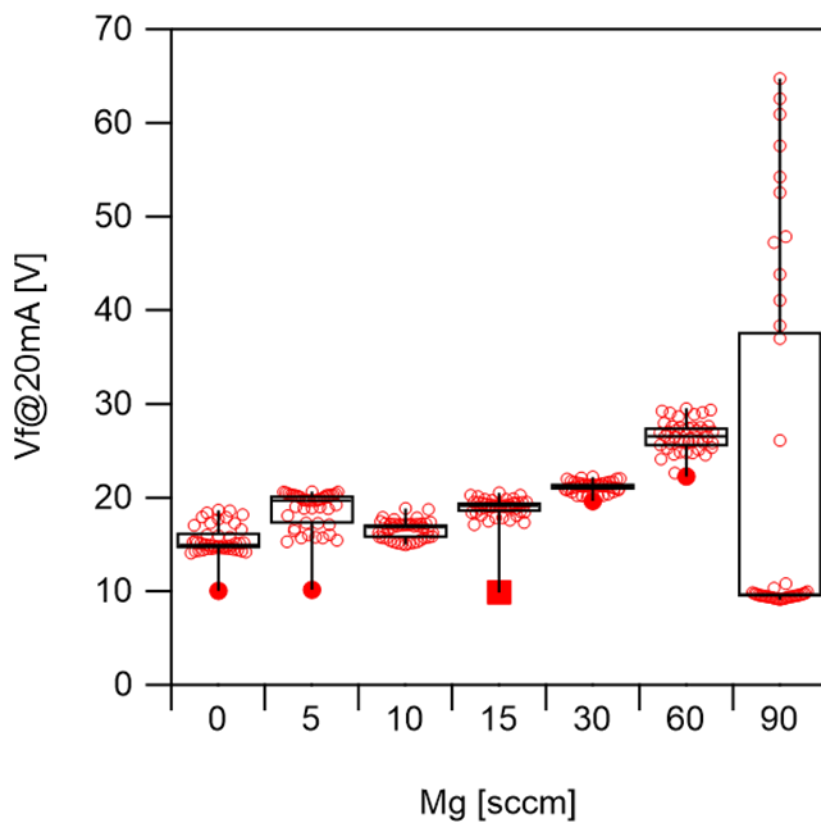


図 3-6 100 mA における電圧の Cp₂Mg 流量依存性

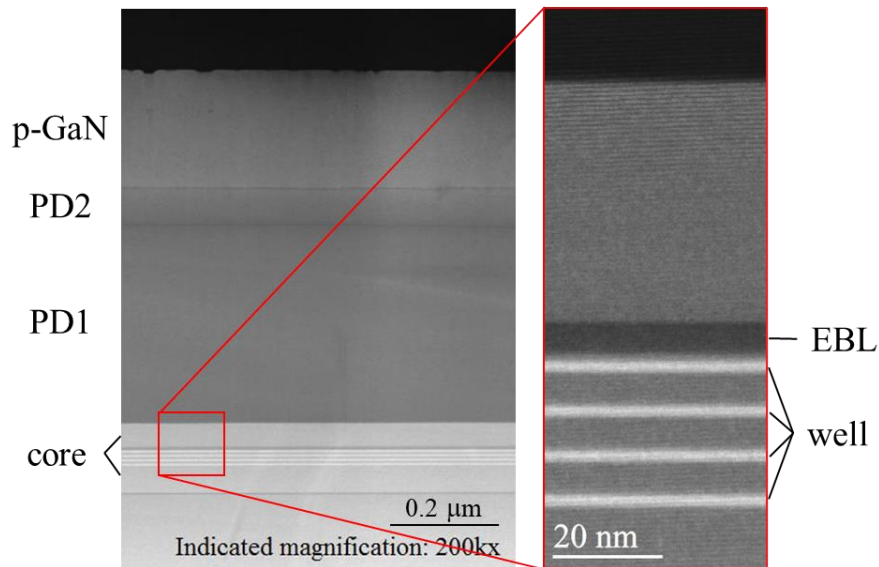


図 3-7 作製試料の HAADF-STEM 像

3.3. シミュレーション計算による改善機構の検討

3.3.1. 注入効率のコア層 Mg 濃度依存性

前節において、p 側コア層への EBL と Mg ドーピングの導入が注入効率の改善に極めて有効な手段であることを実験的に確認した。なお、その改善機構は明らかになっておらず、最適な LD 構造の設計においては、その改善機構の理解が望まれる。特に、アクセプタとして用いられる Mg は深紫外光に対し吸収をもつため、そのドーピング濃度とドーピング領域の選択には慎重を要する。そこで、本節では、シミュレーションソフトウェア SiLENSe 6.3 を用いて、p 側コア層への Mg ドーピングによる注入効率の改善機構について検討を行う。

ここでは、p 側コア層の Mg 濃度のみを変化させた構造について計算を行い、p 側コア層の Mg 濃度が LD 特性に与える影響について調べた。表 3-3 に計算に用いたシミュレーション構造を、図 3-8 にシミュレーション構造の Al 組成プロファイルを示す。計算に用いた Mg 濃度は 0 、 1.0×10^{17} 、 1.0×10^{18} 、 1.0×10^{19} 、 $1.0 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ である。

表 3-3 シミュレーション構造

Layer	Thickness [nm]	Al content	Doping [cm^{-3}]
n-clad	350	0.70	Si: 1.0×10^{19}
n-core	60	0.63	-

2×well	3	0.40	-
barrier	6	0.63	-
p-core	60	0.63	x
PD1	320	1.0 -> 0.7	-
PD2	70	0.7 -> 0	Mg: 1.0×10^{20}
p-GaN	10	0	Mg: 1.0×10^{20}

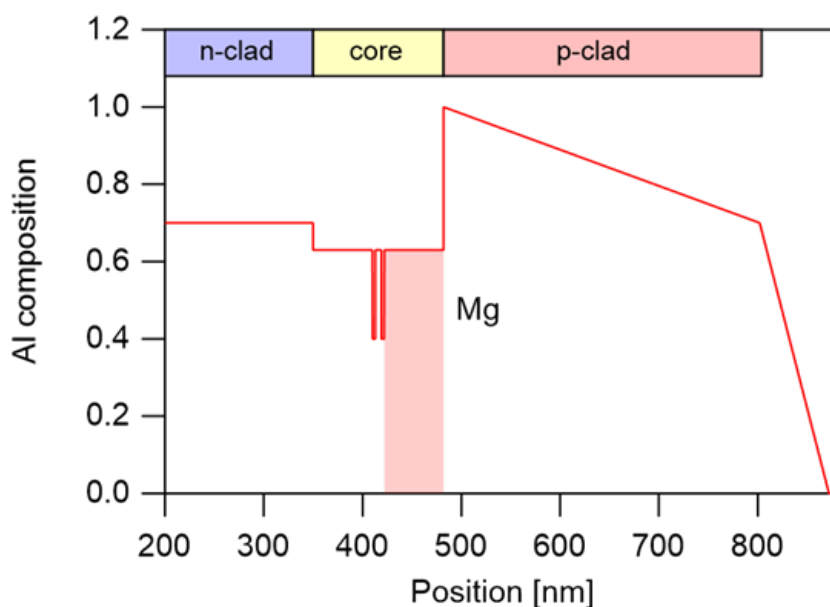


図 3-8 シミュレーション構造の Al 組成プロファイル

図 3-9、図 3-10 にシミュレーション計算により得られた 30 kA/cm^2 におけるバンドダイアグラムと注入効率の Mg 濃度依存性の結果を示す。図 3-10 の破線はノンドープのときの注入効率を示す。図から明らかなように、シミュレーション計算上、Mg ドーピングの効果は認められなかった。これはアクセプタとして用いられる Mg の活性化エネルギーが高く、ドーピングされた Mg の活性化率が低かったためと考えられる。本計算では、Mg の活性化エネルギーは SiLENSe のデータベースに従って、下記式を用いて計算している。

$$E_A = 470x + 170(1 - x) \quad (3-3)$$

ここで、 E_A [meV]は $Al_xGa_{1-x}N$ における Mg の活性化エネルギー、 x は Al 組成である。Al 組成が 0.55 のときの活性化エネルギーは 335 meV であり、室温におけるイオン化率は低く、計算上、バンドダイアグラム、注入効率の変化はほとんど認められなかった。図 3-11 にイオン化 Mg 濃度の Mg 濃度依存性のシミュレーション結果を示す。イオン化率はおよそ 0.13%程度にとどまっており、Mg 濃度が $1.0 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ の高濃度ドーピング条件においてもイオン化 Mg 濃度はわずか 10^{17} cm^{-3} のオーダーとなっている。

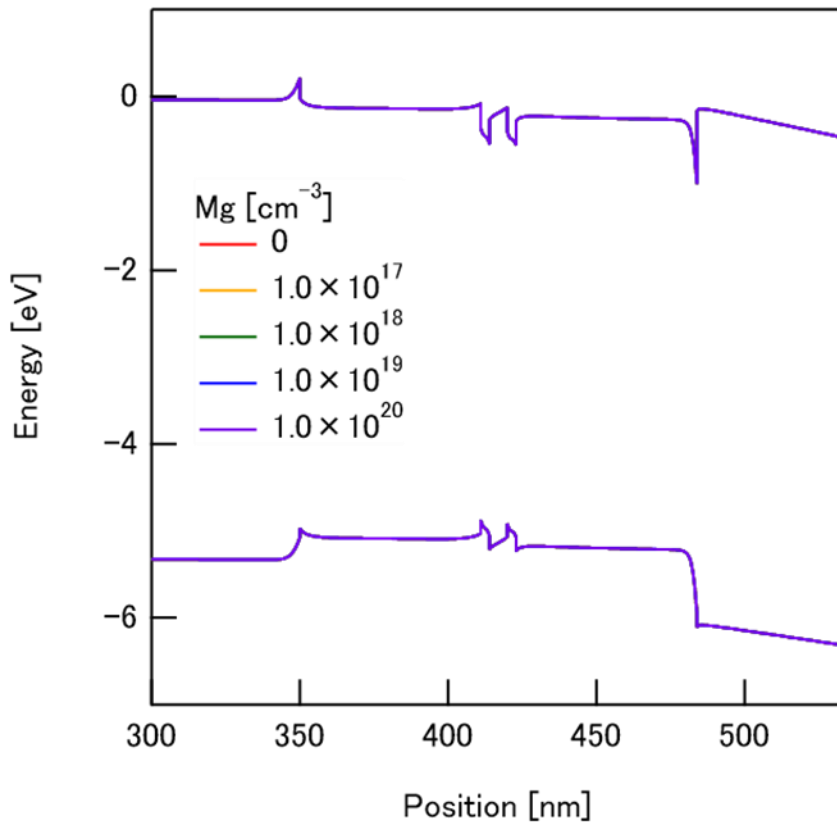


図 3-9 30 kA/cm²におけるバンドダイアグラムの p 側コア層 Mg 濃度依存性

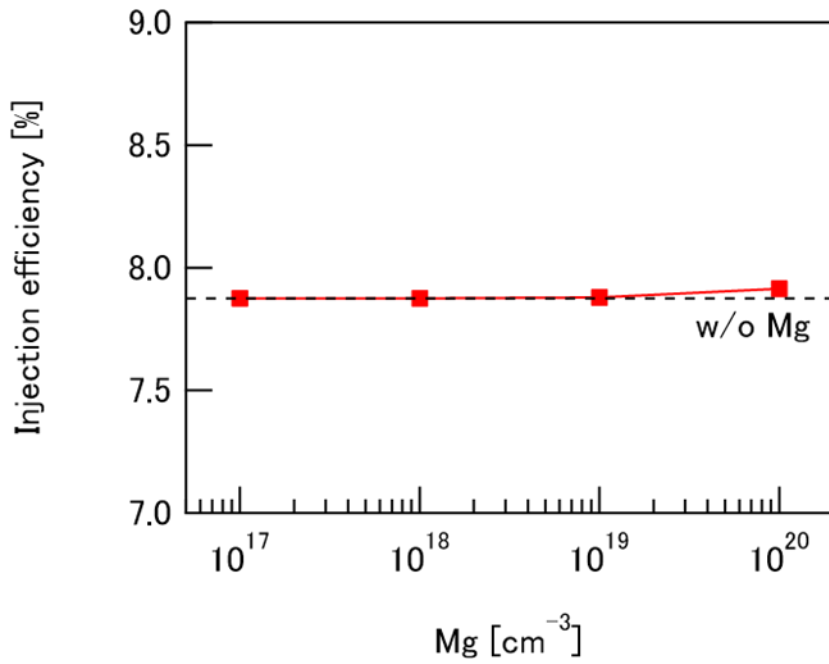


図 3-10 30 kA/cm²における注入効率の p 側コア層 Mg 濃度依存性

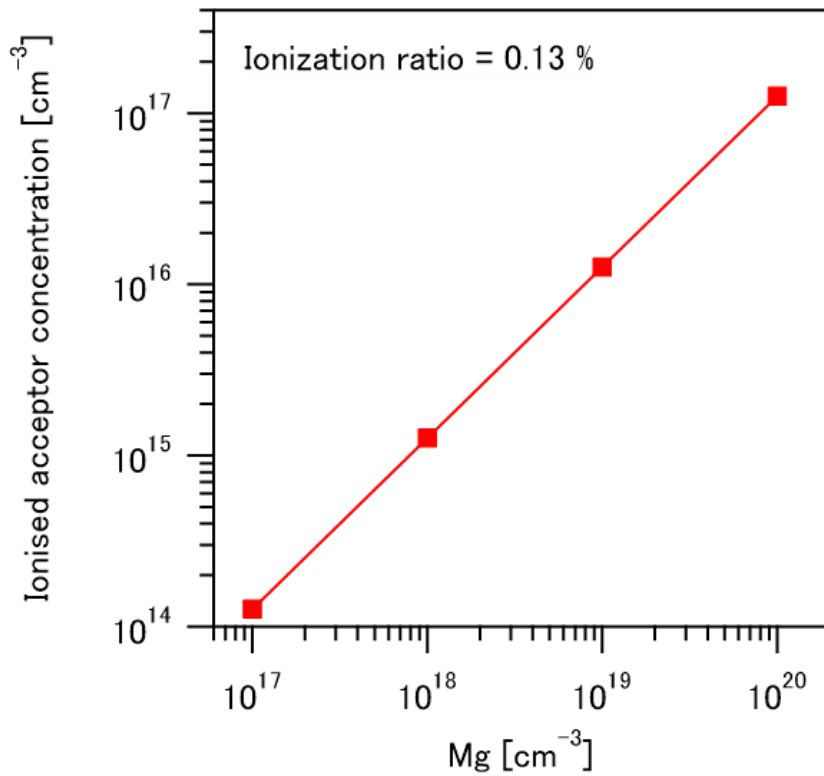


図 3-11 イオン化 Mg 濃度の Mg 濃度依存性の計算結果

3.3.2. 注入効率のコア層 Mg 濃度依存性($E_A = 170 \text{ meV}$)

先の計算では、実験で得られた注入効率の Mg 濃度依存性を再現する結果は得られなかった。

そこで、p 側コア層の Mg の活性化エネルギーを 170 meV に設定し、十分なイオン化 Mg 濃度が得られる条件を用いて改めて同様の計算を行った。活性化エネルギー以外の計算条件はすべて先のシミュレーション計算と等しい。

図 3-12(a)に 30 kA/cm^2 における伝導帯のバンドダイアグラムを、(b)にコア/クラッド層界面近傍の拡大図を示す。(b)の破線は Mg 濃度が 0 、 $1.0 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ のときにおける擬フェルミ準位を示している。Mg の活性化エネルギーを 170 meV に変更した本計算ではバンドダイアグラムの大きな変化が確認された。図 3-12(b)より、Mg 濃度の増加に伴い、コア/クラッド層界面におけるディップの深さが浅くなっていることが確認される。このディップは、コア/クラッド層界面に形成する正の分極電荷によって生じている。

本計算では、コア層の Al 組成を 0.63 、p 側分極ドープ層の初端 Al 組成を 1 としている。したがって、コア/クラッド層($\text{Al}_{0.63}\text{Ga}_{0.37}\text{N}/\text{AlN}$)界面には、その Al 組成差に基づき、 $3.4 \times 10^6 \text{ C/cm}^2$ にも及ぶ巨大な正の分極電荷が蓄積する。この巨大な分極電荷により、伝導帯に深いディップが形成する(図 3-13)。コア/クラッド層界面に生じるディップは、電子ブロック層を兼ねる p 側クラッド層の電子に対する障壁高さを減少させる。したがって、注入効率の改善において、ディップの抑制は非常に有効である。また、このディップの形成は、コア/クラッド層界面近傍に負電荷(イオン化 Mg)を配置し、分極電荷を補償することで抑制可能であると考えられる。

図 3-14 に注入効率の Mg 濃度依存性のシミュレーション結果を示す。なお、先に述べた通り、Mg の活性化エネルギーは 170 meV として計算している。注入効率は Mg 濃度の増加に伴い、著しく増加する結果となった。これより、ディップ形成の抑制に十分なイオン化 Mg 濃度を得られれば、注入効率が大幅に改善し得ることが確認される。

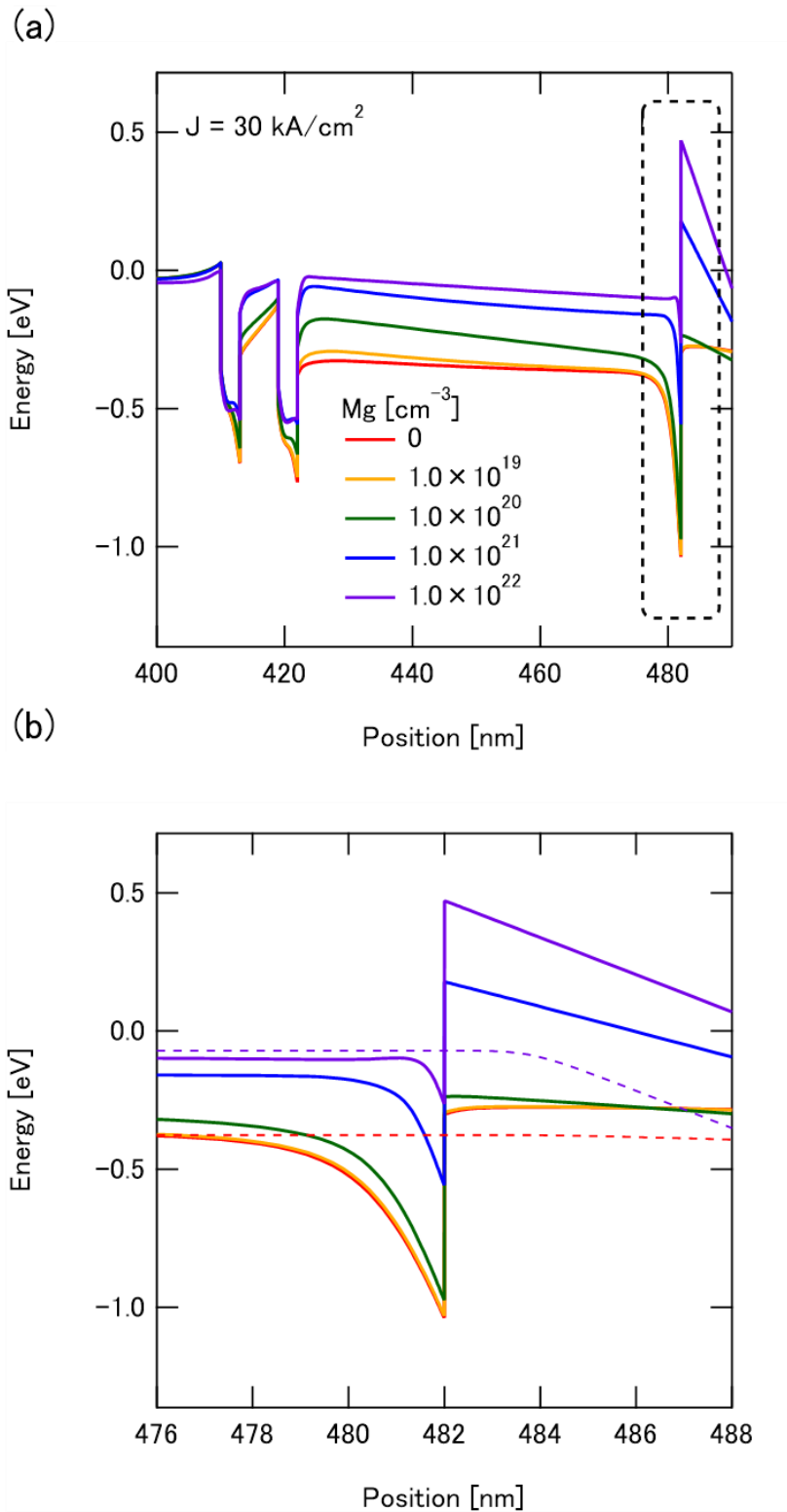


図 3-12 30 kA/cm²における伝導帯のバンドダイアグラム(a)とその拡大図(b)

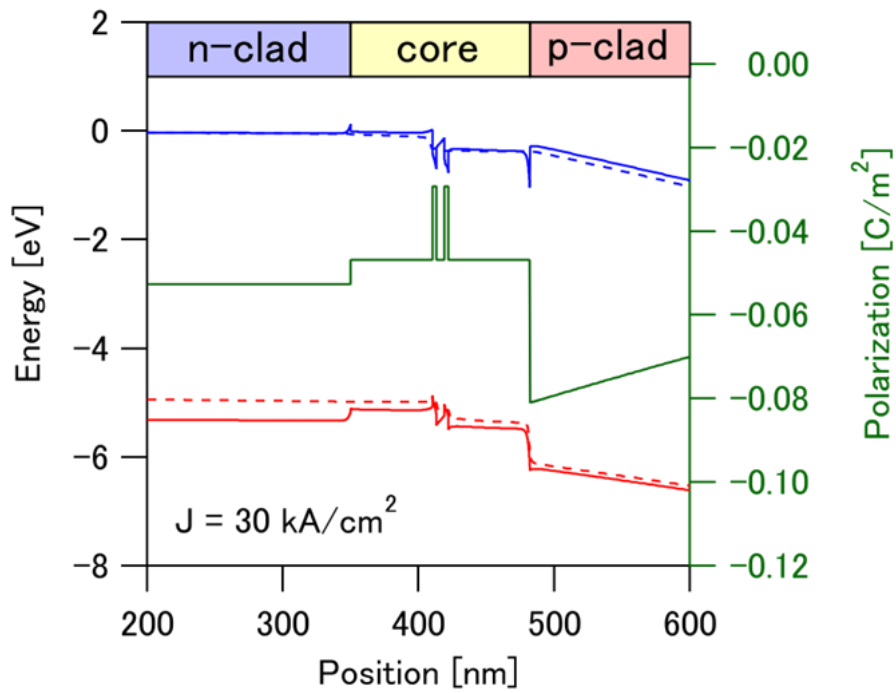


図 3-13 30 kA/cm²におけるバンドダイアグラムと分極分布の計算値

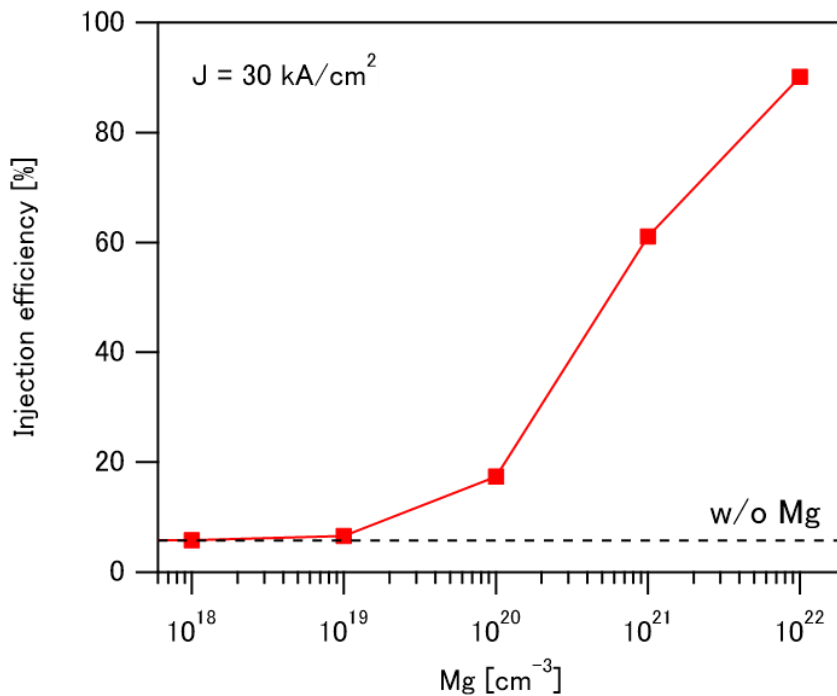


図 3-14 30 kA/cm²における注入効率の Mg 濃度依存性の計算値($E_A=170 \text{ meV}$ に設定)

3.3.3. 部分ドープ構造における注入効率のコア層 Mg 濃度依存性($E_A = 170 \text{ meV}$)

これまでの計算より、コア/クラッド層界面のディップの抑制が、p 側コア層への Mg ドーピングによる注入効率の改善に寄与していることを示唆する結果が得られた。

そこで、改めて Mg ドーピングをコア/クラッド層界面近傍に限定したときのシミュレーション計算を行った。ここでは、p 側コア層のドーピング領域をコア/クラッド層界面近傍の 5 nm の範囲に限定し、コア/クラッド層近傍のイオン化 Mg 濃度が注入効率に与える影響について検討した。このとき、コア/クラッド層界面近傍の Mg のみ活性化エネルギーを 170 meV としてシミュレーション計算を行った。表 3-4 に計算に用いたシミュレーション構造を、図 3-15 にシミュレーション構造の Al 組成プロファイルを示す。表 3-5 に計算に用いたイオン化 Mg 濃度の値をまとめる。

表 3-4 シミュレーション構造

Layer	Thickness [nm]	Al content	Doping [cm^{-3}]
n-clad	350	0.70	Si: 1.0×10^{19}
n-core	60	0.63	-
2×well	3	0.40	-
barrier	6	0.63	-
p-core1	55	0.63	-
p-core2	5	0.63	X
PD1	320	1.0 -> 0.7	-
PD2	70	0.7 -> 0	Mg: 1.0×10^{20}
p-GaN	10	0	Mg: 1.0×10^{20}

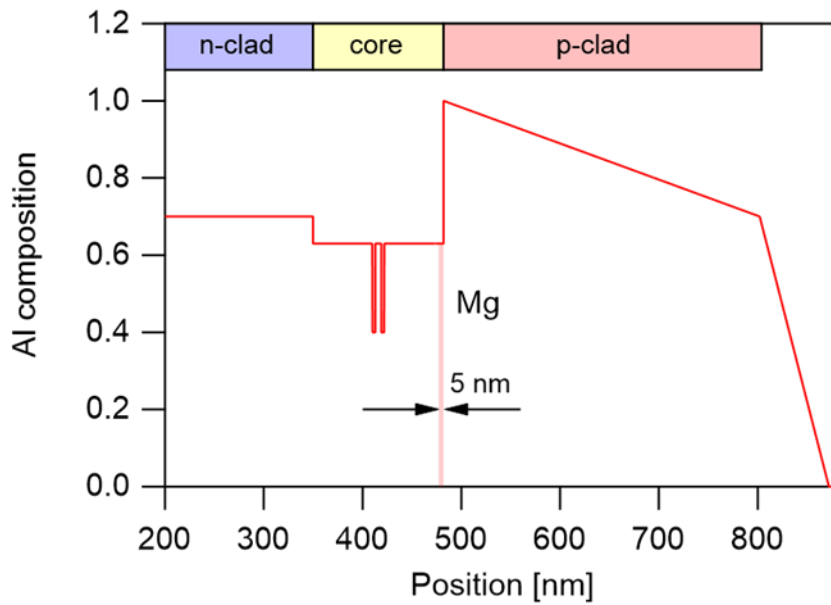


図 3-15 シミュレーション構造の Al 組成プロファイル

表 3-5 シミュレーション計算に用いたイオン化 Mg 濃度

Sample	Ionized Mg [cm^{-2}]
1	0
2	2.1×10^{11}
3	2.0×10^{11}
4	5.2×10^{12}
5	1.0×10^{13}
6	1.5×10^{13}
7	2.0×10^{13}
8	2.4×10^{13}
9	3.0×10^{13}

図 3-16(a)に 30 kA/cm^2 における伝導帯のバンドダイアグラムを、(b)にコア/クラッド層界面近傍の拡大図を示す。(b)の破線はイオン化 Mg 濃度が 0 、 $3.0 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ のときにおけるそれぞれの擬フェルミ準位を示している。

バンドダイアグラムについては、前述のコア層全体に Mg ドーピングを行ったときと同様の傾向が得られた。コア/クラッド層界面近傍のイオン化 Mg 濃度の増加に伴い、コア/クラッド層界面におけるディップの深さが浅くなっており、これにより、電子ブロック層を兼ねる p 側クラッド層の電子に対する障壁高さが増加していることが確認される。これより、注入効率の改善において、コア/クラッド層界面近傍におけるイオン化 Mg 濃度が重要であることが分かる。

図 3-17 に 30 kA/cm²における注入効率と電子ブロック層の電子に対する障壁高さのイオン化 Mg 濃度依存性のシミュレーション結果を示す。図中の赤、青の破線はそれぞれノンドープのときの電子ブロック層の障壁高さと注入効率である。図 3-17 より、コア/クラッド層界面近傍のイオン化 Mg 濃度が 5.0×10^{12} cm⁻²を超えると、電子に対する障壁高さが増加し、これによって、注入効率が顕著に増加することが分かる。

以上より、コア/クラッド層界面近傍に負電荷(イオン化 Mg)を配置し、コア/クラッド層界面の分極電荷を補償することにより、ディップの形成が抑制されること。また、これにより、電子に対する障壁高さが増加し、注入効率の向上が達成し得ることがシミュレーション計算により示された。なお、ここでは Mg の活性化エネルギーを低く設定し、イオン化 Mg がコア/クラッド層界面近傍に配置されたときの特性の変化について調べた。

本来、Mg の活性化エネルギーが高いため、通常の場合においては、注入効率の向上に寄与し得るイオン化 Mg 濃度を得ることは困難であると考えられる。なお、コア/クラッド層界面近傍においては、巨大な正の分極電荷に由来する強力な電界が形成されている。実験においては、電界による活性化エネルギーの減少(プール・フレンケル効果)により[64–67]、注入効率の向上に寄与するイオン化 Mg 濃度が得られていると考えられる。

図 3-18 にコア/クラッド層界面近傍のバンド図と電界強度分布を示す。図 3-18 に示されるように、計算上、コア/クラッド層界面近傍において最大 3.9 MV/cm の極めて強力な電界が生じている。この電界の存在下では、プール・フレンケル効果によって、活性化エネルギーが大幅に減少することが期待される。例えば、Al_{0.71}Ga_{0.29}N/Al_{0.65}Ga_{0.35}N の短周期超格子構造において、プール・フレンケル効果により、0.5 MV/cm の電界によって Mg の活性化エネルギーが 50 meV だけ減少することが報告されている[68]。また、GaN において、Mg 濃度の増加に伴い、Mg の活性化エネルギーが減少することが報告されている[69]。本計算に用いたシミュレーションでは、活性化エネルギーのアクセプタ濃度、電界強度依存性は考慮していない。これらを考慮することによって、注入効率の向上に寄与し得るイオン化 Mg 濃度が得られるものと考えられる。Mg の活性化エネルギーの詳細については次章で述べる。

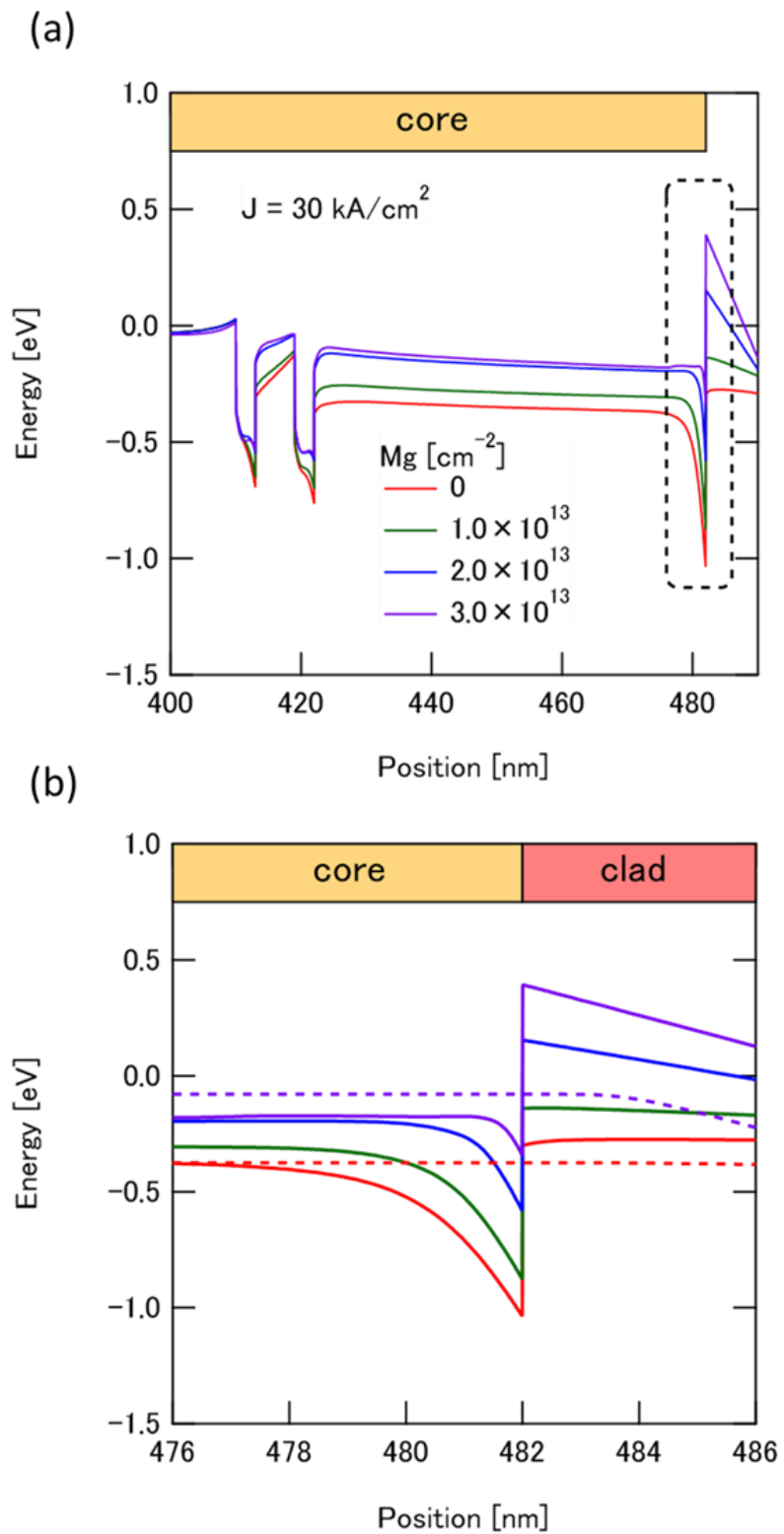


図 3-16 30 kA/cm^2 における伝導帯のバンドダイアグラム(a)とその拡大図(b)

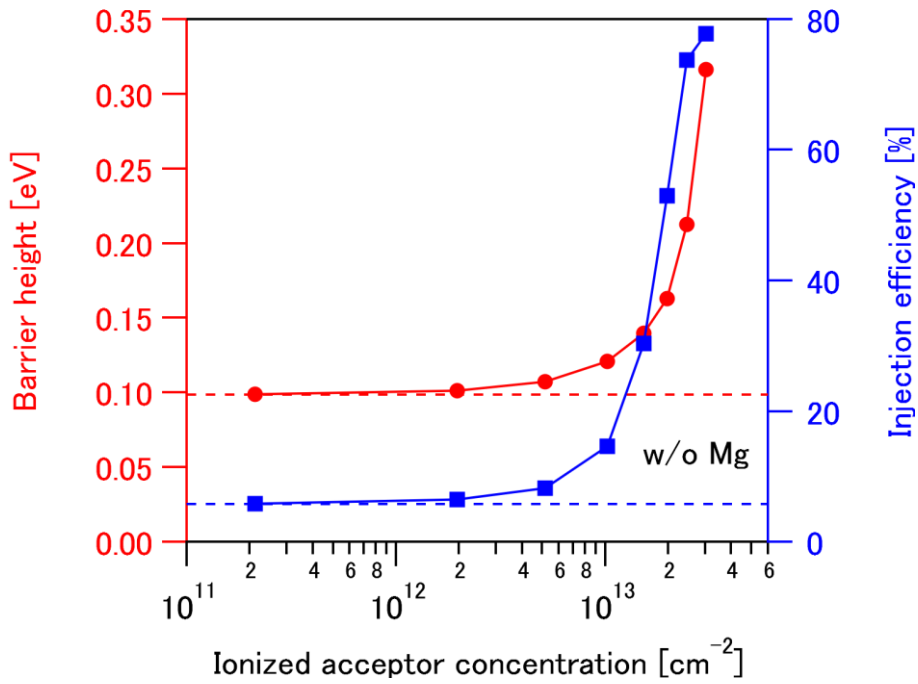


図 3-17 30 kA/cm²における注入効率、障壁高さのイオン化 Mg 濃度依存性の計算値 (E_A=170 meV に設定)

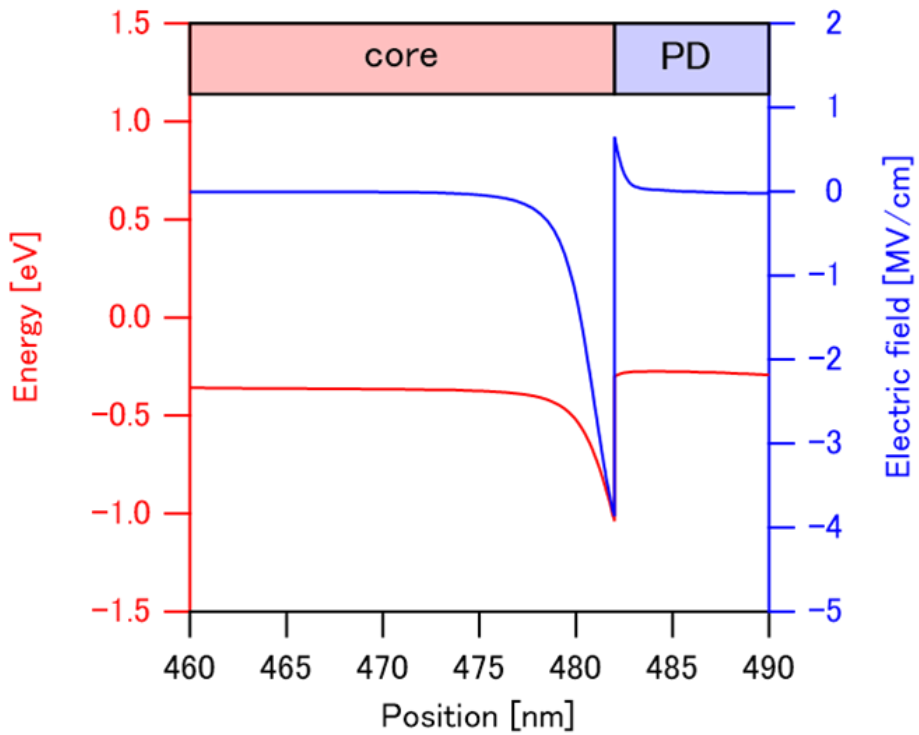


図 3-18 コア/クラッド層界面近傍の伝導帯のバンドダイアグラムと電界強度分布

3.4. 部分ドーピング試料における Cp_2Mg 流量依存性

3.4.1. 実験方法

シミュレーション計算による検討より、コア/クラッド層界面近傍のイオン化 Mg 濃度が注入効率の向上に寄与していると推測される。そこで、p 側コア層における Mg ドーピング領域をコア/クラッド層界面近傍の 5 nm の範囲に限定し、改めて、p 側コア層への Mg ドーピング効果について実験的に検討を行った。

表 3-6 に試料構造を、図 3-19 に作製試料の Al 組成プロファイルを示す。p 側コア層への Mg ドーピングは図 3-19 の赤く塗られたコア/クラッド層界面近傍の 5 nm の領域に対してのみ行った。このとき、p 側コア/クラッド層界面近傍の Cp_2Mg 流量のみ異なる 8 種の LD 試料を作製した。 Cp_2Mg 流量は、10 から 70 sccm までとした。作製試料に対し、LED と同条件で電流-電圧特性、電流-光出力特性の測定を行い、注入効率の指標とした。

表 3-6 試料構造

Layer	Thickness [nm]	Al content	Doping [sccm]
n-clad	1500	0.70	Si: 0.88
n-core	60	0.63	-
2×well	1.7	0.36	-
barrier	6	0.63	-
p-core1	2	0.63	-
EBL	5	0.75	-
p-core2	48	0.63	-
p-core3	5	0.63	Mg: 10 – 70
PD1	360	1.0 -> 0.7	-
PD2	70	0.7 -> 0	Mg: 30
p-GaN	200	0	Mg: 100

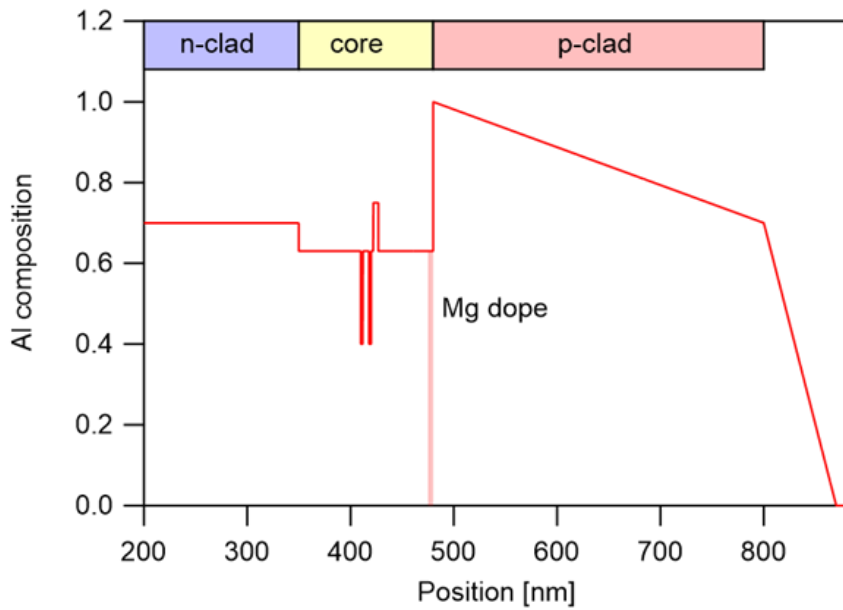


図 3-19 作製試料の Al 組成プロファイル

3.4.2. 結果と考察

図 3-20 に典型的な EQE-電流特性を、図 3-21 に各試料の 100 mA における EQE をボックスプロットで示す。図 3-21 の右端のプロット(Ref.)は全体ドーピング条件で最大の効率を示した試料の EQE を示している。図 3-21 に示すように、100 mA における EQE は Cp_2Mg 流量に対し増加傾向を示し、ドーピング領域をコア/クラッド層界面近傍の 5 nm の領域に限定した部分ドーピング試料においてもリファレンスの全体ドーピング試料におよそ匹敵する EQE が得られた。これより、シミュレーション計算、実験の両面において、コア/クラッド層界面近傍への Mg ドーピングが重要であることが確認された。なお、100 mA における EQE は Cp_2Mg 流量に対し増加傾向を示しているが、 Cp_2Mg 流量が 70 sccm のときはドループが顕著になる結果となった(図 3-20)。

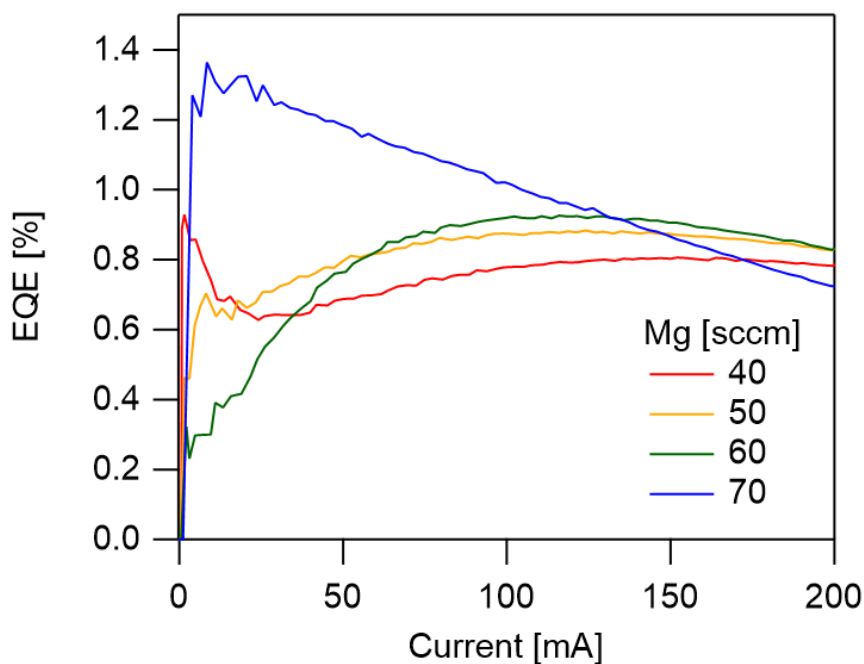


図 3-20 典型的な EQE-電流特性

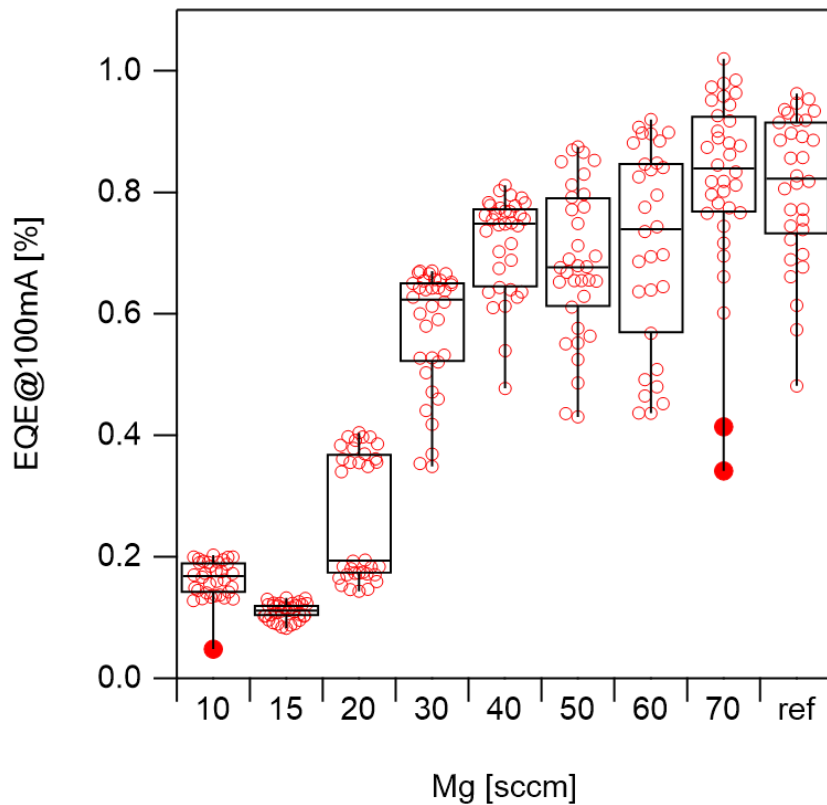


図 3-21 100 mA における EQE のコア層 Cp_2Mg 流量依存性

3.5. 全体ドーピング試料と部分ドーピング試料の比較

3.5.1. 実験方法

なお、先に示した部分ドーピング試料と比較対象とした全体ドーピング試料の試料構造はわずかに異なる。そこで、それぞれ最適化したドーピング条件を用いて、改めて全体ドーピング試料と部分ドーピング試料の比較を行った。ここで、2 試料の各層の膜厚・Al 組成はすべて等しい。異なるのは p 側コア層のドーピング領域と Cp_2Mg 流量のみである。全体ドーピング試料では、EBL と p 側クラッド層に囲まれた p 側コア層全体(53 nm)に Mg ドーピングを行った。部分ドーピング試料では、コア/クラッド層界面近傍の 5 nm の範囲にのみ Mg ドーピングを行った。全体ドーピング試料、部分ドーピング試料の Cp_2Mg 流量はそれぞれ 10、60 sccm とした。それぞれの Al 組成プロファイルと Mg ドーピング領域を図 3-22 に図示する。図中の赤く塗られた領域が p 側コア層の Mg ドーピング領域を示している。

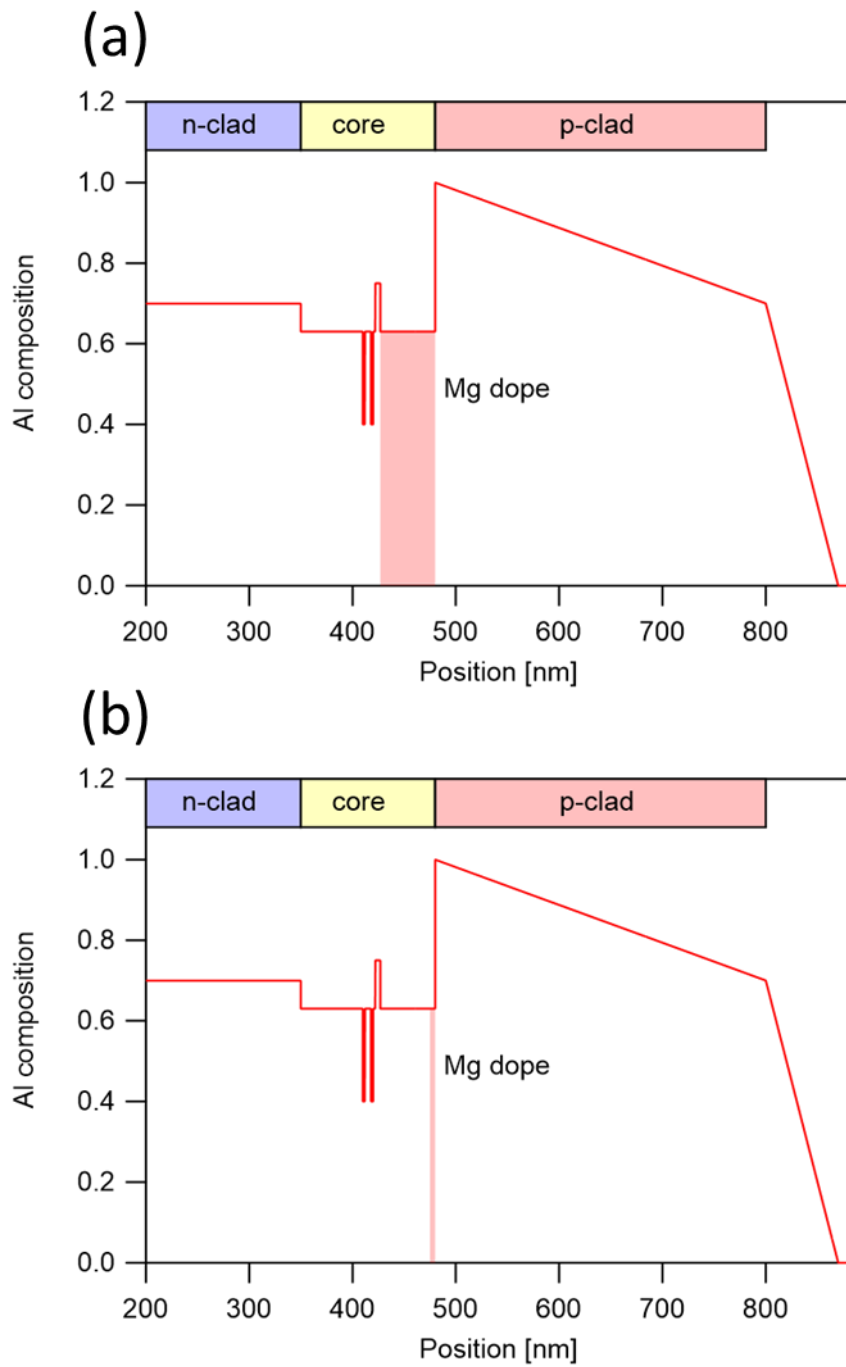


図 3-22 全体ドーピング試料(a)と部分ドーピング試料(b)の Al 組成プロファイルと Mg ドーピング領域

3.5.2. 結果と考察

図 3-23 に全体ドーピング試料と部分ドーピング試料の EQE の電流値依存性を示す。部分ドーピング試料において、EQE の立ち上がりはゆるやかになっているが、電流が 100 mA 以上のときは全体ドーピング試料とおおよそ匹敵する効率を示すことが確認された。図 3-24 に全体ドーピング試料と部分ドーピング試料の 60 mA における規格化 EL スペクトルの比較を示す。両試料はおおよそ等しいスペクトル形状を示すことが確認された。

以上の結果より、Mg のドーピング領域をコア/クラッド層界面近傍の 5 nm の範囲に限定した部分ドーピング試料においても顕著な注入効率の改善効果が見られることが確認された。既に述べたように、アクセプタとして用いられる Mg は、深紫外光に対し吸収をもつため、そのドーピング領域とドーピング濃度の選択には慎重を要する。ここで得られた部分ドーピング試料構造はコア/クラッド層界面近傍の 5 nm の範囲にのみ Mg ドーピングを行っているため、Mg に由来する内部損失の増加を大幅に低減されることが期待される。そこで、部分ドーピング試料構造を用いて、Mg に由来する内部損失の値を計算により見積もった。ここでは、コア/クラッド層界面近傍の 5 nm の範囲に $1.0 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ の Mg がドーピングされているものとして計算した。

図 3-25 に部分ドーピング試料の屈折率分布と光強度分布を示す。図中の赤く塗られた領域は Mg がドーピングされている領域を示す。本計算において、Mg がドーピングされた領域と光強度分布の重なりは 0.6 %、Mg に由来する内部損失の値は 0.4 cm^{-1} となった。したがって、部分ドーピング構造を用いることにより、内部損失の増加を抑制したまま、顕著な注入効率の改善が図れることが示された。以上より、深紫外 LD の低閾値化において非常に重要な知見が得られた。

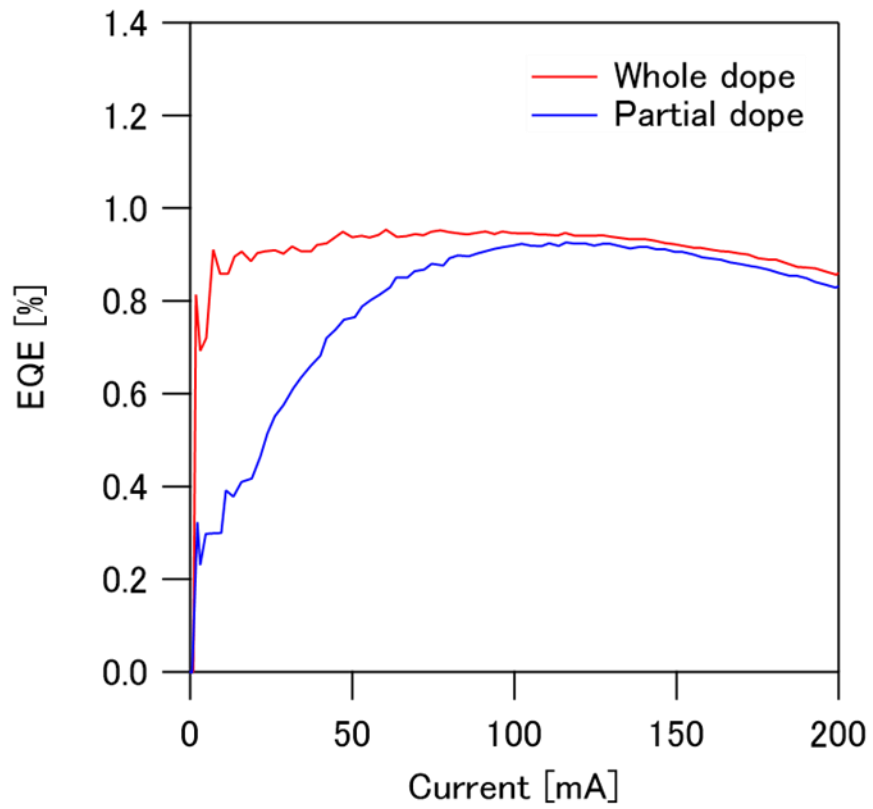


図 3-23 全体ドーピング試料、部分ドーピング試料の EQE の電流依存性

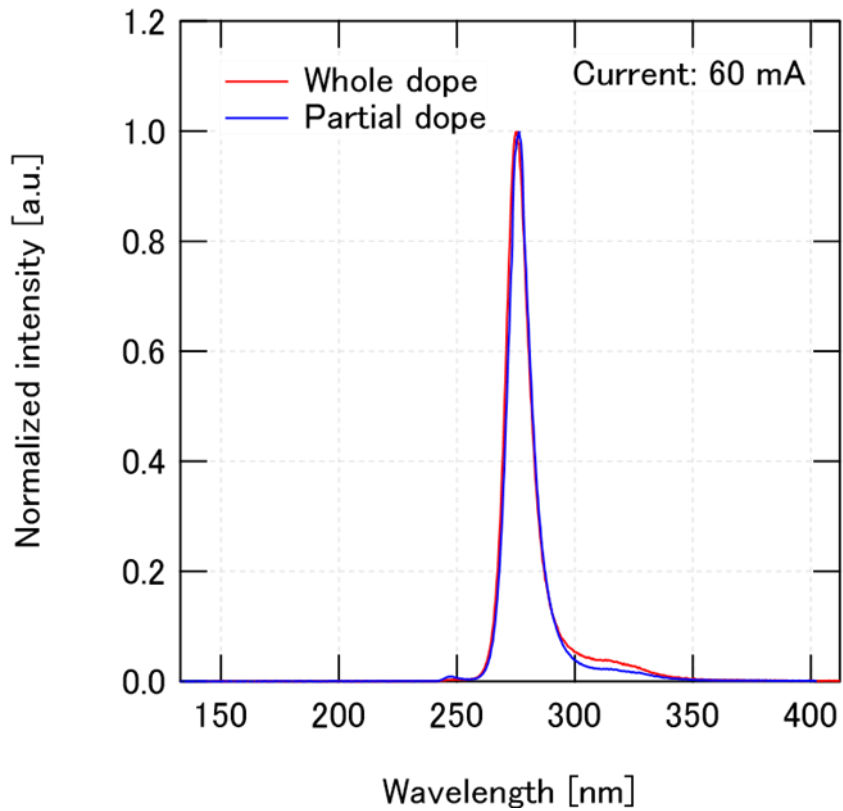


図 3-24 全体ドーピング試料、部分ドーピング試料の規格化 EL スペクトル

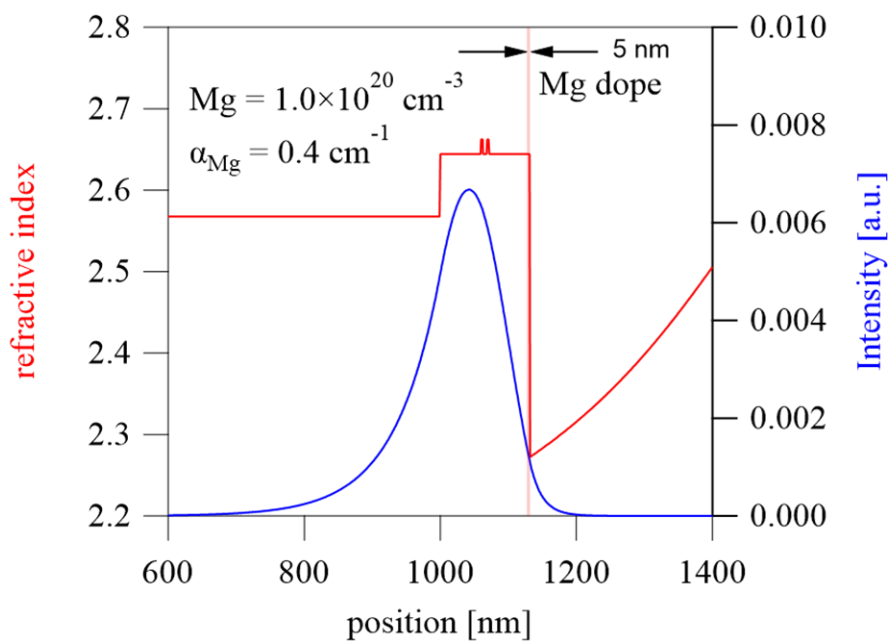


図 3-25 部分ドーピング試料における屈折率分布と光強度分布

3.6. EBL 導入効果の検討

3.6.1. 実験方法

シミュレーション計算、及び、実験により、コア/クラッド層界面近傍への Mg ドーピングが注入効率の改善に寄与することを確認した。本節では、改めて EBL が持つ役割について検討を行う。

ここでは、図 3-26、表 3-7 に示すように 4 種の試料を作製した。基準となるリファレンス試料(試料 1)、基準となるリファレンス構造に対し、EBL のみを導入したもの(試料 2)、Mg ドーピングのみを導入したもの(試料 3)、EBL と Mg ドーピングを導入したもの(試料 4)の 4 種の試料を用意し、その EL 特性の比較を行った。また、Mg ドーピングについては、先の実験において最大の EQE が得られた 10 sccm の条件を用いている。表 3-8 にリファレンス試料の試料構造を示す。これら試料に対し、LED と同条件で EL スペクトル測定、電流-電圧特性、電流-光出力特性の測定を実施した。

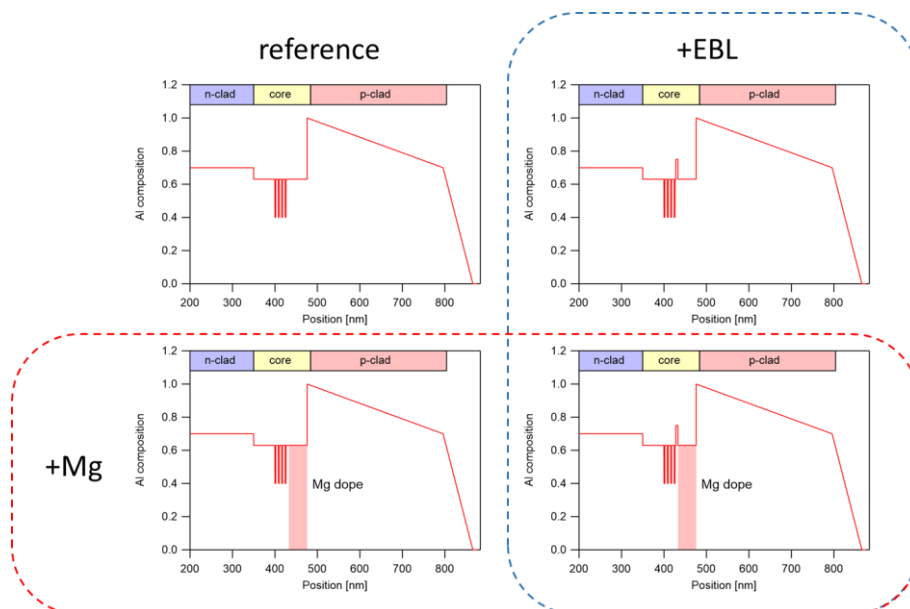


図 3-26 作製試料の Al 組成プロファイルとドーピング領域

表 3-7 試料構造条件

No.	EBL	Mg
-----	-----	----

Sample 1	w/o	w/o
Sample 2	w/o	w/
Sample 3	w/	w/o
Sample 4	w/	w/

表 3-8 リファレンスの試料構造

Layer	Thickness [nm]	Al content	Doping [sccm]
n-clad	1500	0.70	Si: 0.88
n-core	50	0.63	-
4×well	1.7	0.36	-
4×barrier	6	0.63	-
p-core	50	0.63	-
PD1	360	1.0 -> 0.7	-
PD2	70	0.7 -> 0	Mg: 30
p-GaN	200	0	Mg: 100

3.6.2. 結果と考察

図 3-27 に複数個所で測定した各試料の 20 mA における EL スペクトルを示す。また、図 3-27 を対数表示したものを図 3-28 に示す。リファレンス試料のスペクトルにおいては、波長 250 nm 位置にコア層の発光、波長 287 nm 位置に井戸発光が見られている。リファレンス構造に EBL のみを導入した試料 2 では、スペクトル形状に顕著な差は見られなかった。一方、リファレンス構造に、Mg ドーピングのみを行った試料 3 では、スペクトル形状が大きく変化し、波長 300 nm 付近に Mg 由来のブロードなピークが出現した。なお、Mg ドーピングのみを導入したときは、Mg 由来の発光が支配的であったが、この構造に対し、EBL を導入した試料 4 では、Mg 由来の発光が低減し、井戸発光が支配的になった。さらに、コア層の発光が抑制されるとともに、井戸層の発光強度が著しく増加した。

図 3-29 に複数個所で測定した各試料の光出力の電流値依存性を示す。試料 1 と試料 2 は比較的近い特性を示した。Mg ドーピングのみを導入した試料 3 は複雑な変化を示した。EBL と Mg ドーピングを導入した試料 4 については、試料 1 と比較して、およそ 10 倍の光

出力を示し、かつ、ドループ特性が大幅に改善する結果が得られた。以上の結果より、注入効率の大幅な改善は EBL と最適な Mg ドーピングが導入されたときのみに見られることが分かる。

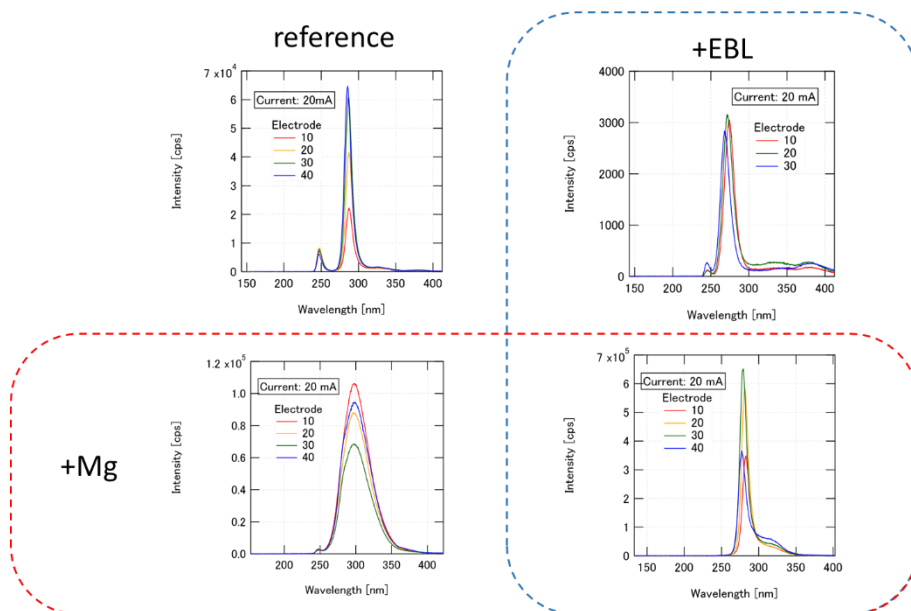


図 3-27 20 mA における EL スペクトルの比較

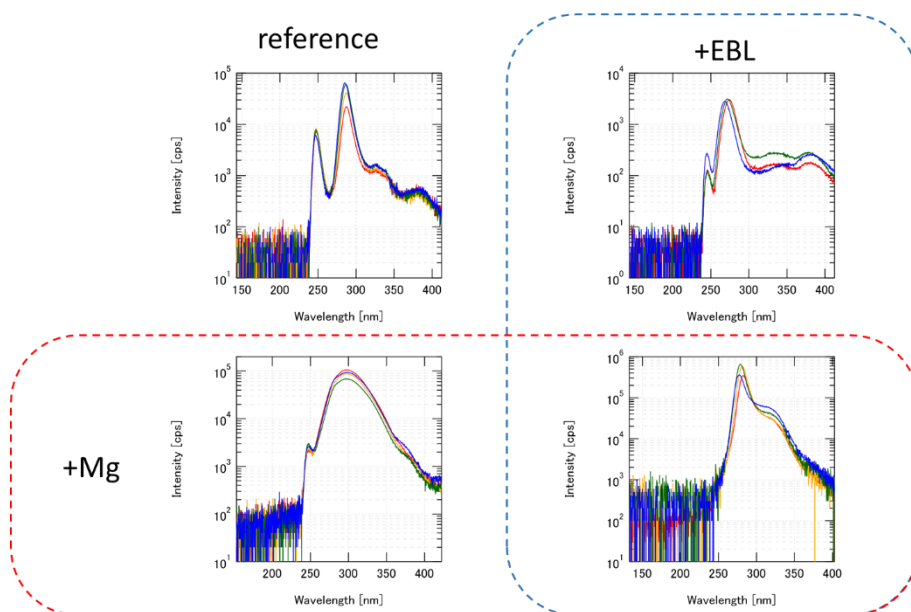


図 3-28 20 mA における EL スペクトルの比較(対数表示)

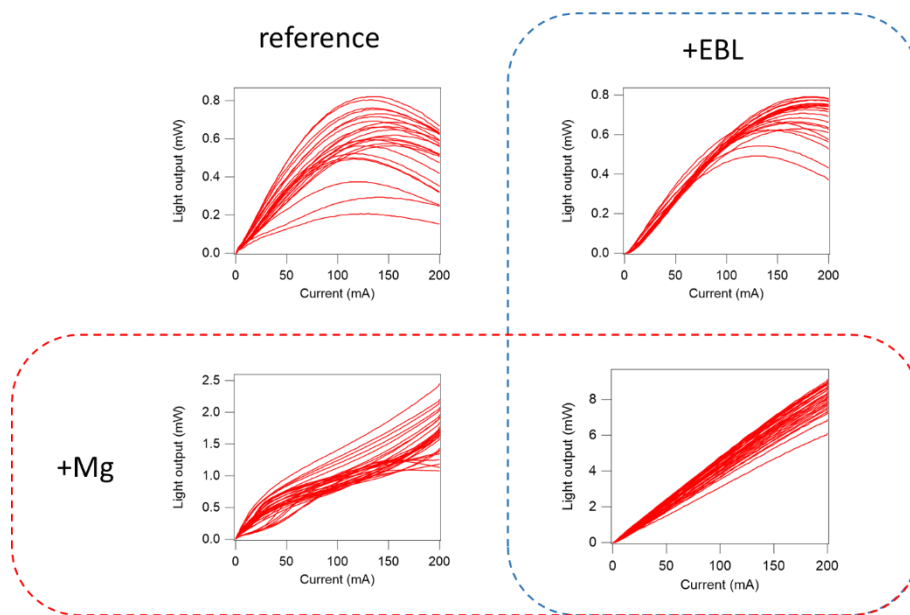


図 3-29 光出力の電流値依存性の比較

ここで、複雑な変化を示した試料3のEL特性について、より詳しく述べる。試料3の典型的な光出力の電流値依存性を図3-30に示す。光出力は低電流時に大きく立ち上がり、その後、緩やかに勾配が減少している。電流が100 mA程度に達すると再び勾配が増加し、光出力が大きく増加する結果となっている。より詳細に調べるために、図中の破線の位置に対応する電流値ごとにELスペクトルの測定を行った。このときのELスペクトルの測定結果を図3-31に示す。低電流値時には、波長300 nm付近のMg由来の発光が支配的であり、電流値の増加に伴い、井戸発光が支配的となる結果が得られた。また、各電流値におけるELスペクトルについてカーブフィッティングを行い、コア発光、井戸発光、及び、Mg由来の発光の電流値依存性をそれぞれ算出した。カーブフィッティングにより得られた結果を図3-32に示す。Mg由来の発光は低電流時においては電流に比例して増加するが、電流値が60 mAを超えると減少する結果となった。また、井戸発光は、低電流時は緩やかに増加するが、電流値が100 mA以上になると勾配が大きく増加した。その結果、電流値が120 mA以上のときは井戸発光が支配的となっている。

以上より、電流値が200 mAの条件においては、いずれの試料においても井戸発光が支配的となっている。そこで、各試料の200 mAにおけるEQEを図3-33にボックスプロットにて示す。EQEは、リファレンスの試料1とEBLのみを導入した試料2でおおよそ同等の値を示している。一方、Mgドーピングのみ導入した試料3においては最大で0.3%に近いEQEが得られており、Mgドーピングのみでも注入効率の改善効果があることが確認される。な

お、EBL と Mg ドーピングの両者を導入した試料 4 では、リファレンスのおよそ 10 倍の EQE が得られており、EBL と Mg ドーピングの併用が肝要であることが分かる。

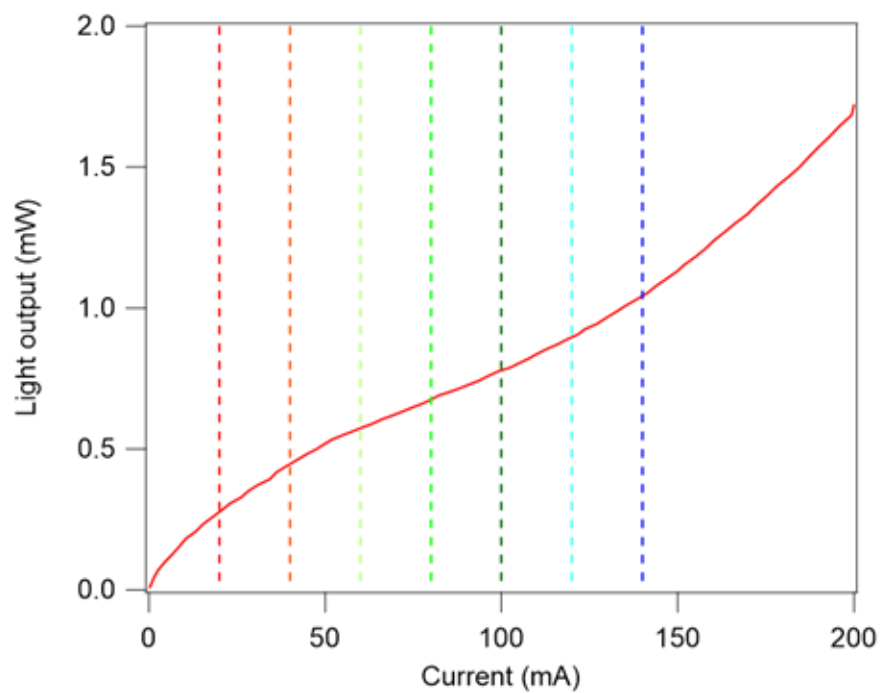


図 3-30 試料 3 の典型的な光出力-電流特性

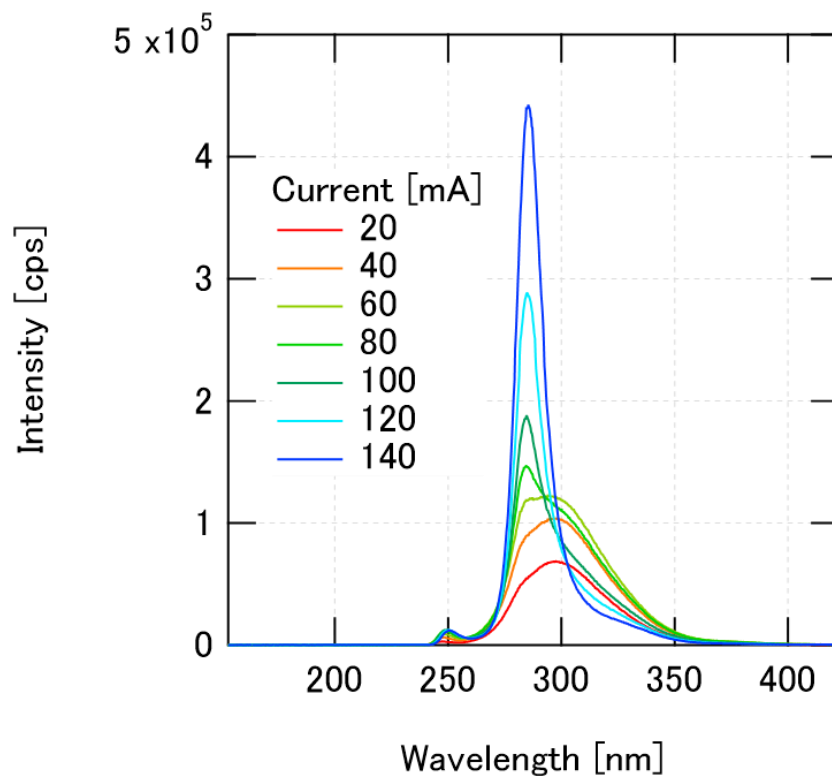


図 3-31 試料 3 の EL スペクトルの電流値依存性

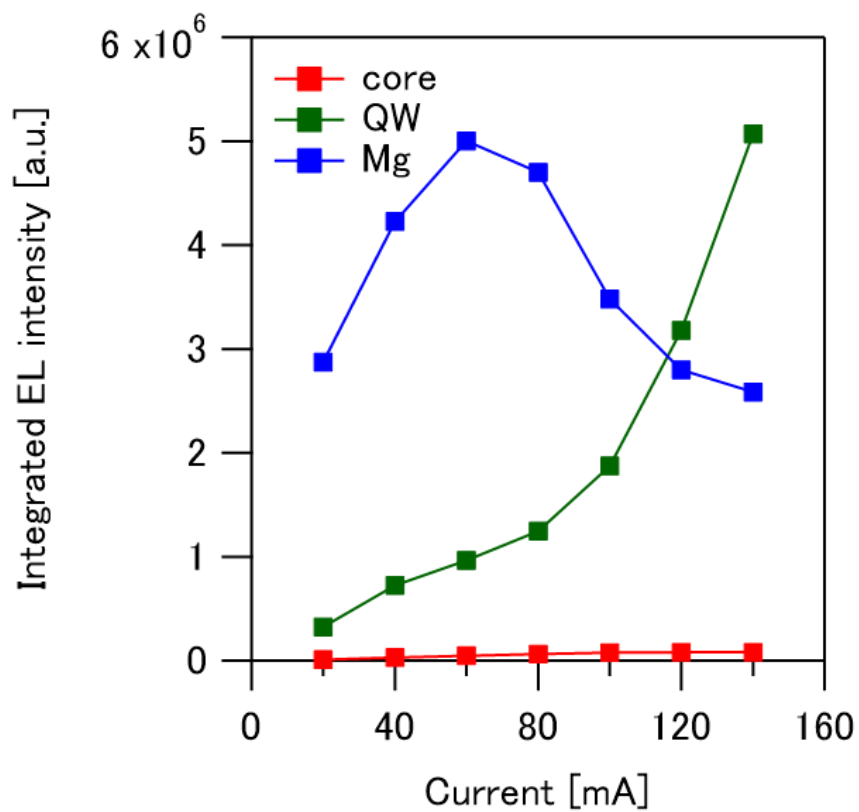


図 3-32 井戸発光、コア発光、及び、Mg 由来発光の電流値依存性

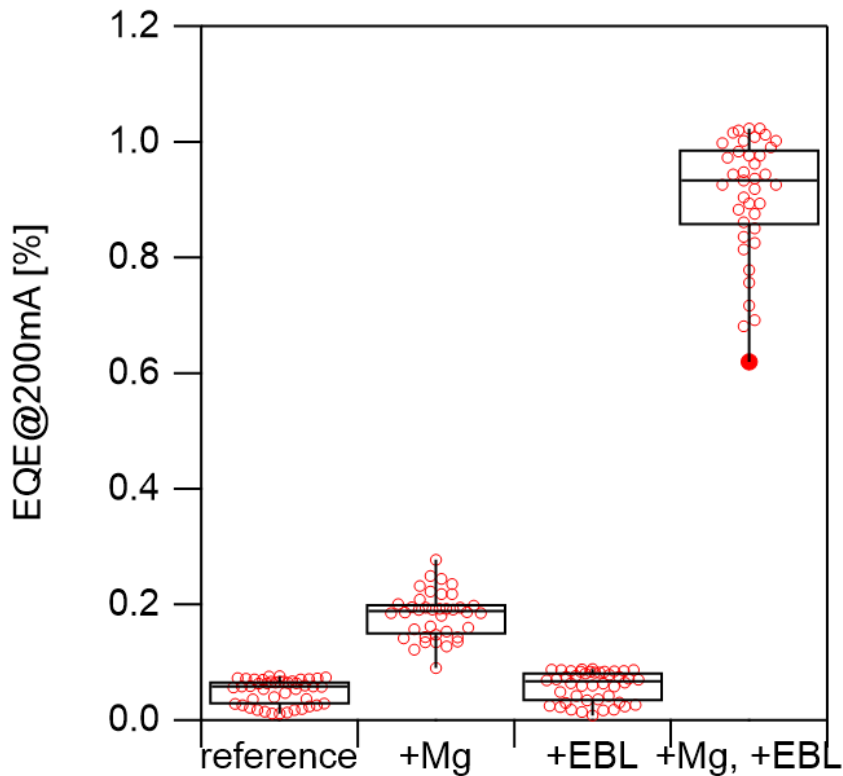


図 3-33 200 mA における EQE の比較

3.7. シミュレーション計算による EBL 効果の検討

3.7.1. EBL 効果の検討

先の実験より、顕著な注入効率の改善を得るには、p 側コア層への EBL の導入が重要であることが実験的に確認された。ここでは、シミュレーション計算を用いて、コア層に EBL を設けたときの影響について検討を行う。

まず、EBL の効果について調べるため、図 3-34(a)に示すリファレンス構造と、このリファレンス構造に対し EBL を挿入したときの構造(図 3-34(b))についてシミュレーション計算を実施した。本計算では、量子井戸から 3 nm の位置に Al 組成 0.75、膜厚 5 nm の EBL を挿入した。このときの、30 kA/cm²におけるバンド図の比較を図 3-35 に示す。図より、EBL を挿入することにより、バンドダイアグラムが大きく変化していることが分かる。本計算では、EBL を挿入することにより、量子井戸と EBL の間に深いディップが形成しており、これにより、p 側コア層において擬フェルミ準位が伝導帯に深く侵入し、p 側コア層にキャリアが

蓄積する結果となっている。図 3-36 に 30 kA/cm^2 における発光再結合レートの分布の比較を示す。シミュレーション計算においては、EBL を挿入することで、p 側コア層における再結合レートが著しく増加している。これにより、コア層でのキャリアの消耗が大きく増加し注入効率が低下する。図 3-37 に注入効率の電流密度依存性の比較を示す。本計算では、p 側コア層へ EBL を挿入することにより、注入効率が著しく低下する結果となった。

なお、実験においては、EBL の導入による注入効率の低下や、コア層の発光強度の増加は確認されておらず、実験結果を説明するシミュレーション結果は得られなかった。

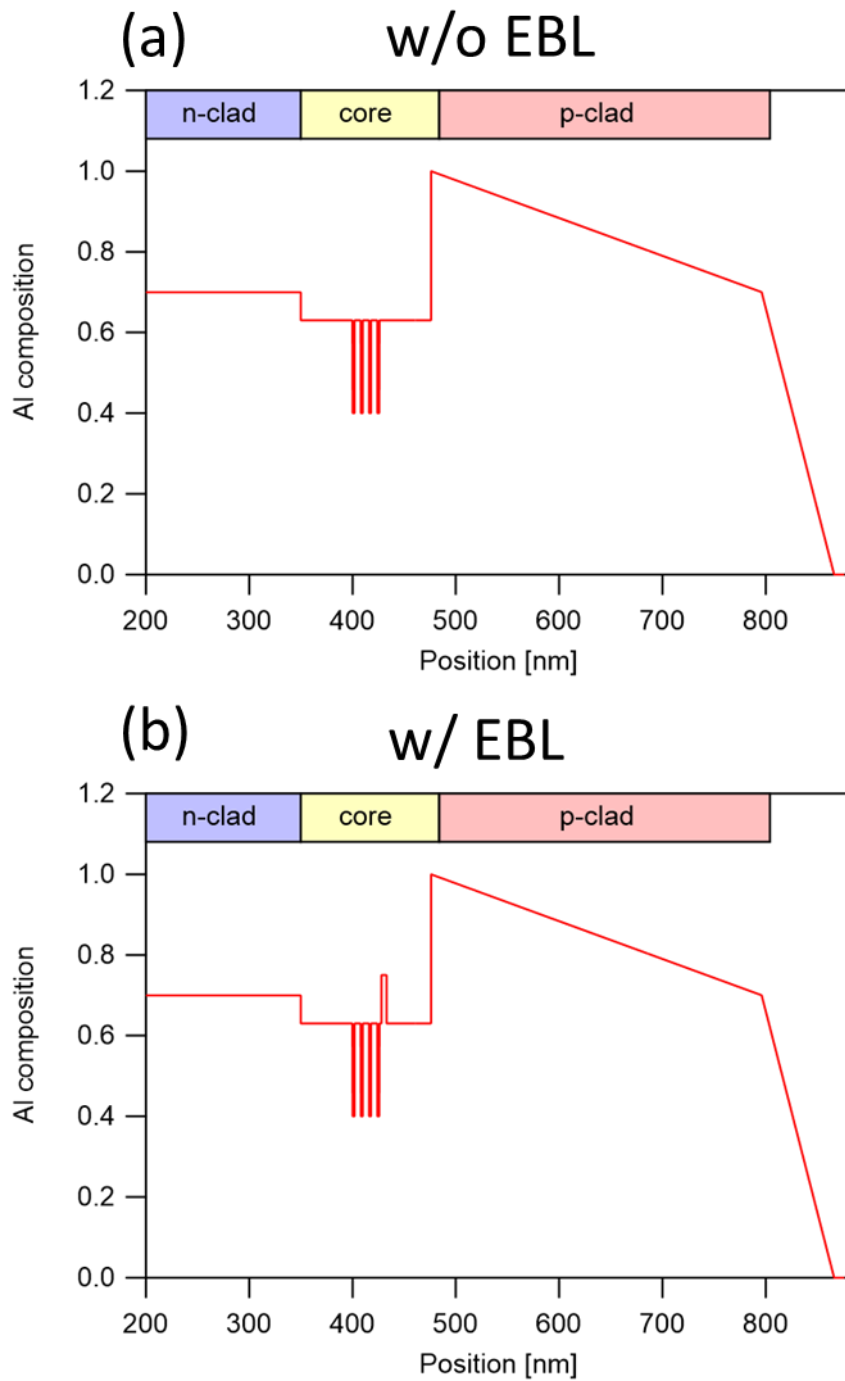


図 3-34 シミュレーション構造

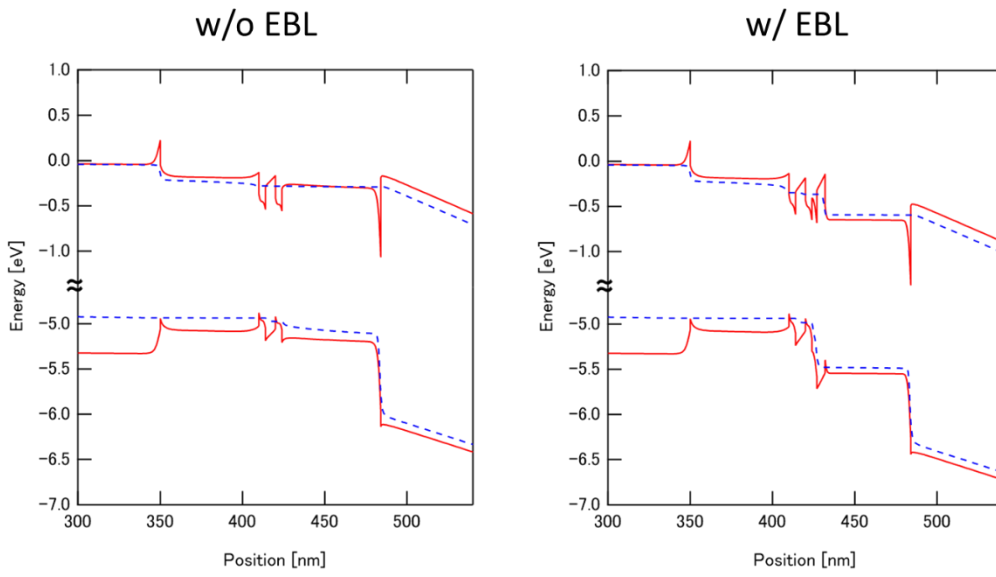


図 3-35 30 kA/cm² にバンドダイアグラムの比較

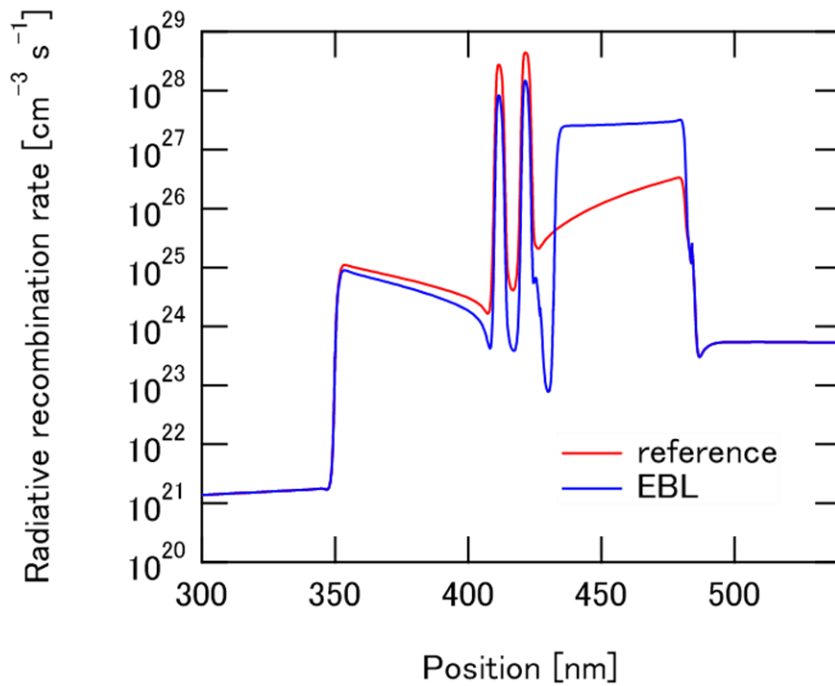


図 3-36 発光再結合レートの比較

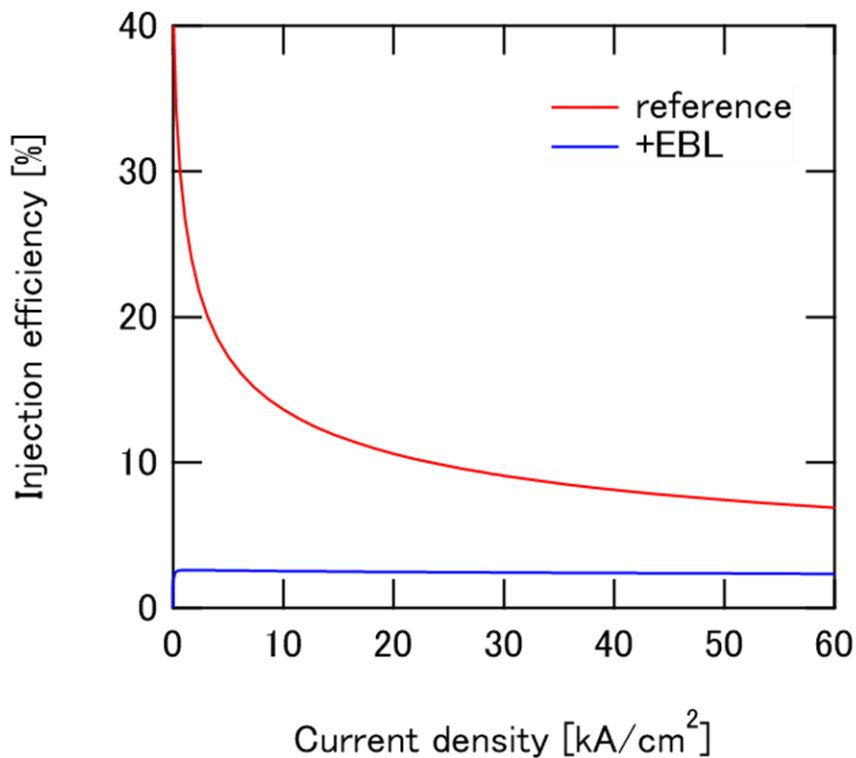


図 3-37 注入効率の電流密度依存性の比較

3.7.2. EBL 膜厚依存性

ここで得られた注入効率の低下は、EBL の挿入によってコア/EBL 界面に生じるディップによって生じている。このディップはコア/EBL 界面に生じる分極電荷によって生じている。したがって、このディップの深さはコア層と EBL の組成差に依存する。また、EBL 膜厚の増加に伴い、ディップが深くなることが報告されている[70]。そこで、ディップ形成を抑制するためにコア層と EBL の組成差を小さくした条件で、EBL の膜厚が注入効率に与える影響について調べた。

表 3-9 にシミュレーション構造を示す。ここでは、EBL を含む p 側コア層全体の膜厚が一定の条件で EBL 膜厚を変化させた構造についてシミュレーション計算を実施した。

図 3-38 に 30 kA/cm² における EBL 近傍の伝導帯のバンドダイアグラムを示す。EBL の膜厚の増加に伴い、ディップが深くなっていることが分かる。図 3-39 に注入効率の EBL 膜厚依存性を示す。図中の破線は EBL がいないときの注入効率を示している。計算上、注入効率は EBL 膜厚の増加に伴い、単調に減少する結果となった。つまり、EBL を挿入しないときに最大の注入効率を得られるという結果になった。また、図 3-40 に電流密度が 30 kA/cm² のときの活性層での再結合電流(Jwell)、活性層以外での再結合電流(Jother)、リーク電流

(Jleakage)の内訳を示す。リーク電流密度は EBL 膜厚に依存せずにおよそ一定の値を示しており、計算上の EBL の導入による注入効率の低下は活性層以外で再結合電流の増加によってもたらされるという結果になった。リーク電流は p 側クラッド層を越えて、p 層へとオーバーフローするキャリア密度に依存する。したがって、リーク電流は EBL を兼ねる p 側クラッド層の電子に対する障壁高さに依存する。本計算では、p 側クラッド層の電子に対する障壁高さは、コア層 EBL とはほぼ独立に決まるという結果になった。活性層以外での再結合電流密度(Jother)は、EBL の膜厚の増加に伴い単調に増加している。これは、ディップの形成により、p 側コア層にキャリアが蓄積し、p 側コア層における再結合レートが増加するためである。

なお、実験的には EBL の導入によるコア層由来の発光の増加、及び、注入効率の低下は見られておらず、シミュレーション計算から予想されるデメリットは生じていない。EBL と Mg ドーピングの導入による注入効率の改善において、EBL が担う役割については、さらなる検討が必要である。

表 3-9 シミュレーション構造

Layer	Thickness [nm]	Al content	Doping [cm^{-3}]
n-clad	350	0.70	Si: 1.0×10^{19}
n-core	60	0.55	-
2×well	4	0.40	-
barrier	6	0.55	-
p-core1	3	0.55	-
EBL	X	0.60	-
p-core2	57 - X	0.55	-
PD1	320	1.0 -> 0.7	-
PD2	70	0.7 -> 0	Mg: 1.0×10^{20}
p-GaN	10	0	Mg: 1.0×10^{20}

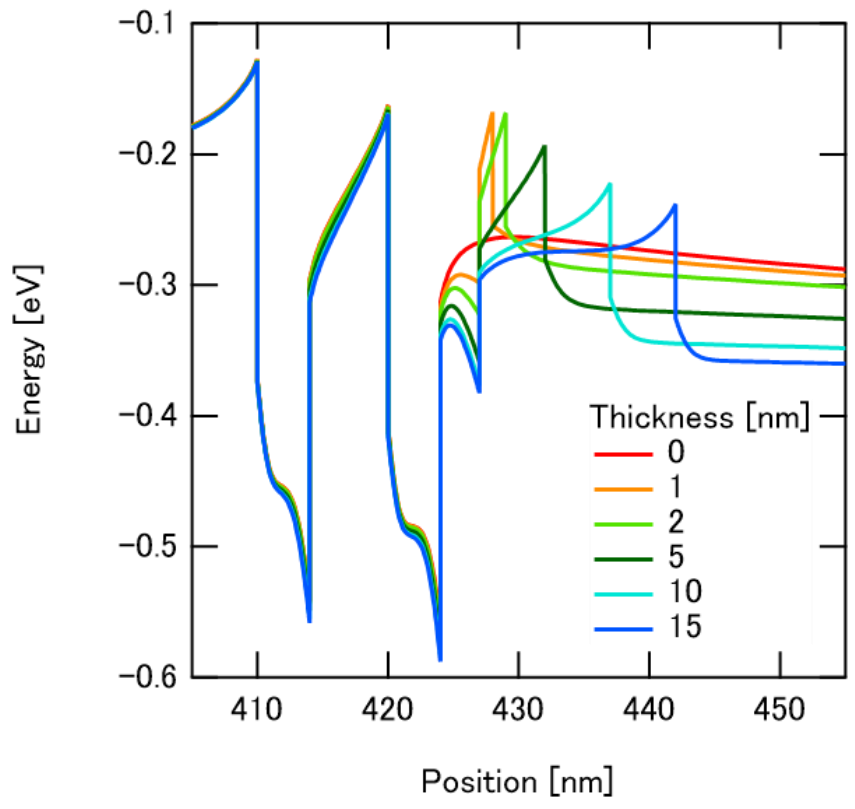


図 3-38 30 kA/cm²における EBL 近傍の伝導帯のバンドダイアグラム

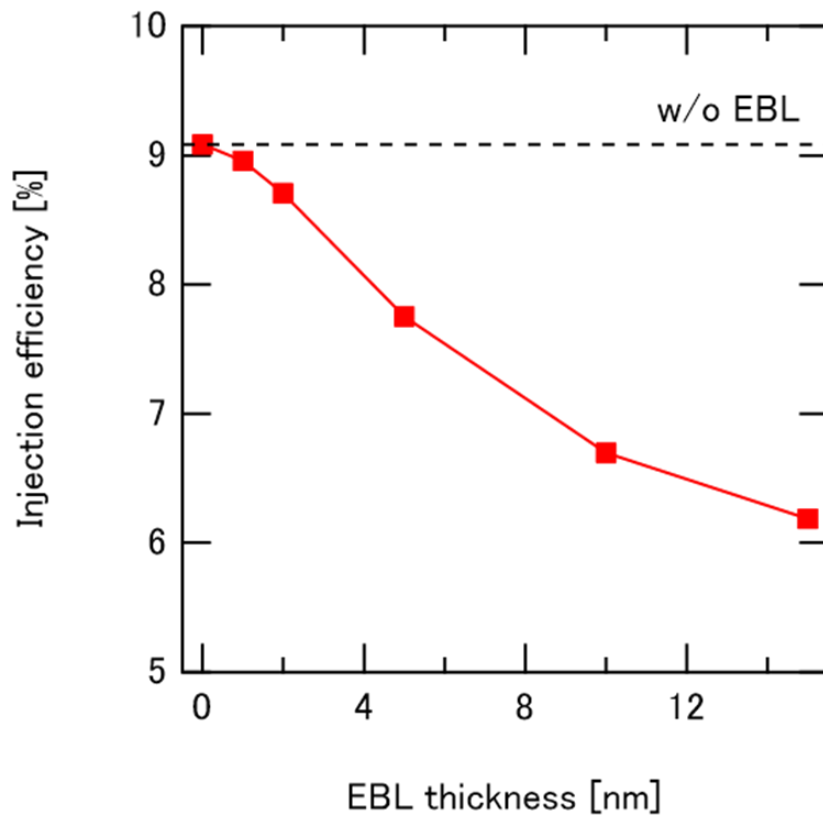


図 3-39 注入効率の EBL 膜厚依存性

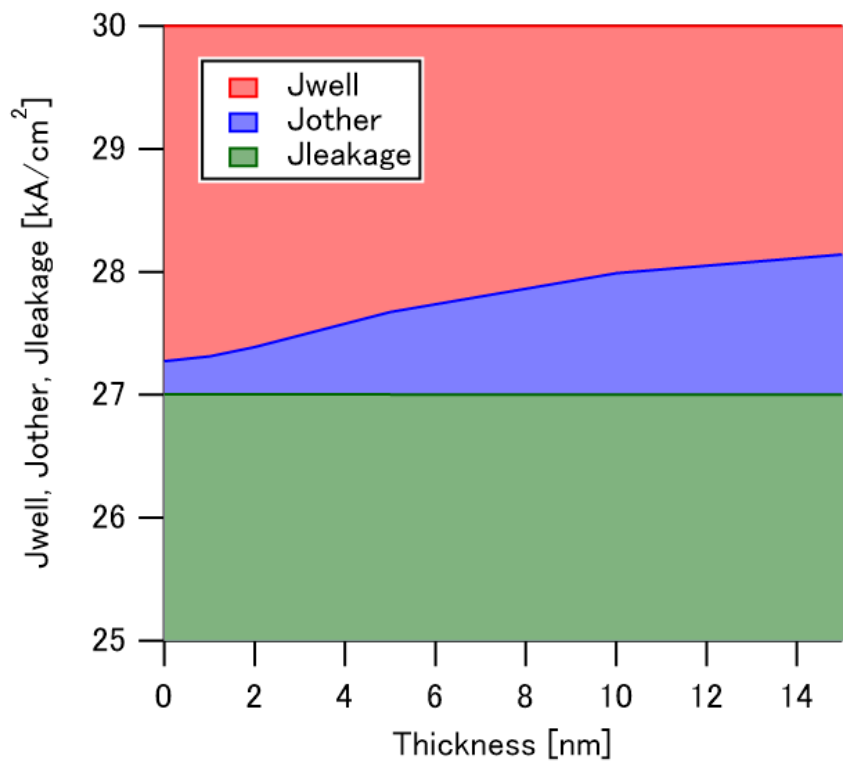


図 3-40 30 kA/cm²における Jwell、Jother、Jleakage の EBL 膜厚依存性

第4章 活性化エネルギーの Mg 濃度・電界強度依存性

4.1. 緒言

第3章において、コア/クラッド層界面近傍にイオン化 Mg を配置することで、顕著な注入効率の改善が期待されることを確認した。なお、AlGaIn 結晶において、アクセプタとして用いられる Mg の活性化エネルギーは高く、かつ、その傾向は Al 組成の増加に伴い、より顕著になる。シミュレーション計算においては、コア層 Al 組成が 0.63 のときは、注入効率の向上に寄与するイオン化 Mg 濃度は得られないという結果になった。

なお、Mg の活性化エネルギーはアクセプタ密度に依存して減少すること、プール・フレネル効果により、電界印加によって減少することが知られている。なお、これらの効果を適切に盛り込んだ活性化エネルギーの計算モデルはない。

そこで、本章では、アクセプタ密度、及び、電界強度の関数として Mg の活性化エネルギーを記述する計算モデルを提案する。次いで、これを用いて、注入効率の向上に寄与し得るイオン化アクセプタ濃度が得られるか検討を行う。

4.2. 従来モデルの検討

4.2.1. Götz のモデル

GaN における活性化エネルギーのアクセプタ濃度依存性については、広く Götz のモデルが用いられている[71]。Götz のモデルは次式で表される。

$$E_A(N_A^-) = E_{A,0} - f \frac{q^2}{4\pi\epsilon} (N_A^-)^{\frac{1}{3}} \quad (4-1)$$

$$f = \Gamma\left(\frac{2}{3}\right) \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (4-2)$$

ここで、 E_A は活性化エネルギー、 $E_{A,0}$ はアクセプタ濃度が十分低いときの活性化エネルギー、 q は電気素量、 ϵ は誘電率、 f は幾何学的因子、 N_A^- はイオン化アクセプタ濃度である。幾何学的因子 f は、異なるイオン化アクセプタを見出す確率を記述するパラメータとされている。

4.2.2. 幾何学的因子の検討

まずは幾何学的因子の意味・妥当性の検討から行う。見通しをよくするため、Götz の式を次式で書き換える。

$$E_A(N_A^-) = E_{A,0} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon s} \quad (4-3)$$

$$s = \frac{\left(\frac{4\pi}{3}N_A^-\right)^{\frac{1}{3}}}{\Gamma(2/3)} \quad (4-4)$$

このとき、式(4-3)は、着目するアクセプタから距離 s だけ離れた位置に存在するイオン化アクセプタが作るポテンシャルの分だけ活性化エネルギーが減少すると解釈される。このときの距離 s は最近接のイオン化アクセプタとの距離の期待値と思われる。

まず、イオン化アクセプタの最近接距離の期待値を計算することにする。

不純物濃度が N のとき、体積 V の中には NV 個の不純物が存在すると期待される。このとき、体積 V の中に x 個の不純物が存在する確率はポアソン分布を用いて次式で表される。

$$f(x, V) = \frac{(NV)^x}{x!} e^{-NV} \quad (4-5)$$

最近接の不純物との距離を r とする。このとき、次のふたつの条件が満たされる必要がある。第一に、半径 r の範囲にはひとつも不純物が存在しないこと。第二に半径 r の球と半径 $r+dr$ の球に区切られた微小領域に少なくともひとつ以上の不純物が存在すること(図 4-1)。

第一の条件が満たされる確率は、

$$f\left(0, \frac{4\pi r^3}{3}\right) = \frac{(NV)^0}{0!} e^{-N\frac{4\pi}{3}r^3} = e^{-N\frac{4\pi}{3}r^3} \quad (4-6)$$

である。

続いて、第二の条件が満たされる確率について考える。ふたつの球に区切られた微小領域の体積は次式で与えられる。

$$dV = \frac{4\pi r^3}{3} - \frac{4\pi(r+dr)^3}{3} \sim 4\pi r^2 dr \quad (4-7)$$

この微小領域にひとつ以上の不純物が存在する確率は、

$$1 - f(0, 4\pi r^2 dr) = 1 - \frac{(NV)^0}{0!} e^{-4\pi Nr^2} = 1 - e^{-4\pi Nr^2} \sim 4\pi Nr^2 \quad (4-8)$$

したがって、距離 r の位置に初めて不純物を見つける確率は、

$$f(r)dr = 4\pi Nr^2 e^{-N \cdot \frac{4\pi r^3}{3}} dr \quad (4-9)$$

となる。

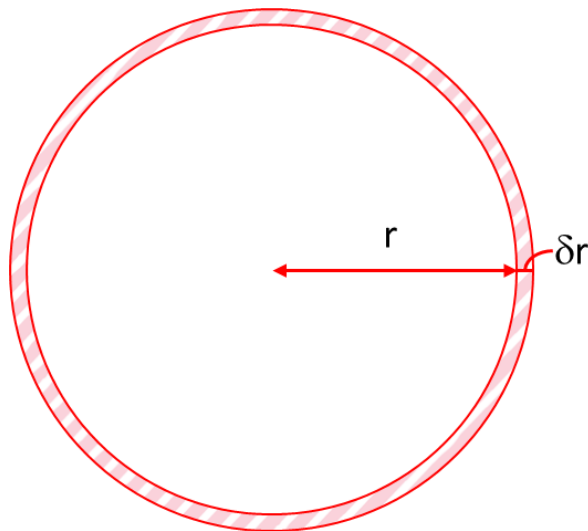


図 4-1 距離 r の位置に最近接不純物を見出す条件

以上より、最近接距離の期待値 s は次式で与えられる。

$$s = \int_0^{\infty} r f(r) dr = \int_0^{\infty} 4\pi Nr^3 e^{-N \cdot \frac{4\pi r^3}{3}} dr \quad (4-10)$$

ここで、 $t=4\pi Nr^3$ とおいて計算を進めると、

$$t = N \cdot \frac{4\pi r^3}{3}, \quad \frac{dt}{dr} = 4\pi N r^2, \quad r = \left(\frac{3t}{4\pi N}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (4-11)$$

$$s = \int_0^\infty 4\pi N r^3 e^{-N \cdot \frac{4\pi r^3}{3}} dr = \int_0^\infty r \cdot 4\pi N r^2 e^{-N \cdot \frac{4\pi r^3}{3}} dr = \left(\frac{3}{4\pi N}\right)^{\frac{1}{3}} \int_0^\infty t^{\frac{1}{3}} \cdot e^{-t} dt \quad (4-12)$$

ここで、次式で表されるΓ関数を用いる。

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt \quad (4-13)$$

このとき、(4-12)式の最右辺は次のように変形される。

$$s = \left(\frac{3}{4\pi N}\right)^{\frac{1}{3}} \int_0^\infty t^{\frac{1}{3}} \cdot e^{-t} dt = \left(\frac{4\pi}{3} N\right)^{-\frac{1}{3}} \Gamma(4/3) \quad (4-14)$$

以上の結果より、Götz のモデルにおける幾何学的因子 f は、 $\Gamma(3/4)$ を使うべきところを、 $1/\Gamma(2/3)$ を使っていると考えられる。

ここで、検算を兼ねて、指数分布を用いて d 次元における最近接距離の期待値の計算を行う。

ポアソン分布に従ってある単位 μ あたりに 1 回起こるようなランダムなイベントについて、イベントの発生間隔は平均 μ の指数分布に従う。

$$f(x) = \frac{1}{\mu} e^{-\frac{x}{\mu}} \quad (x \geq 0) \quad (4-15)$$

これを不純物に置き換えて考える。まず、 d 次元球の体積はΓ関数を用いて次式で表される。

$$V = \frac{\pi^{\frac{d}{2}} r^d}{\Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} \quad (4-16)$$

不純物密度を N 、不純物をひとつだけ含むと期待される体積を V_1 とおくと、 V_1 は次式を満たす。

$$1 = V_1 \cdot N = \frac{\pi^{\frac{d}{2}} r_1^d}{\Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} \cdot N \quad (4-17)$$

不純物がランダムに分布しているとき、体積 V の中に最近接不純物が含まれる確率は、指数分布を用いて次式で与えられる。

$$f(V) = \int_0^V \frac{1}{V_1} e^{-\frac{x}{V_1}} dx \quad (4-18)$$

上式を半径 r の関数に書き換える。

$$x = \frac{\pi^{\frac{d}{2}} r^d}{\Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)}, \quad \frac{dx}{dr} = \frac{d\pi^{\frac{d}{2}} r^{d-1}}{\Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} \quad (4-19)$$

$$\int_0^V \frac{1}{V_1} e^{-\frac{x}{V_1}} dx = \int_0^r \frac{d\pi^{\frac{d}{2}} r^{d-1}}{V_1 \Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} e^{-\frac{r^d}{r_1^d}} dr \quad (4-20)$$

したがって、 d 次元球において、距離 r の位置に初めて不純物を見つける確率 $f(r)$ は次式で与えられる。

$$f(r) = \frac{d\pi^{\frac{d}{2}} r^{d-1}}{V_1 \Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} e^{-\frac{r^d}{r_1^d}} \quad (4-21)$$

上の式を用いると、不純物の最近接距離の期待値 s は次式で表される。

$$s = \int_0^\infty r f(r) dr = \int_0^\infty \frac{d\pi^{\frac{d}{2}} r^d}{V_1 \Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} e^{-\frac{r^d}{r_1^d}} dr \quad (4-22)$$

ここで、 $t = r^d/r_1^d$ とおいて計算を進めると、

$$t = \frac{r^d}{r_1^d}, \quad \frac{dt}{dr} = \frac{dr^{d-1}}{r_1^d}, \quad r = r_1 t^{\frac{1}{d}} \quad (4-23)$$

$$\begin{aligned} s &= \int_0^\infty \frac{d\pi^{\frac{d}{2}} r^d}{V_1 \Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} e^{-\frac{r^d}{r_1^d}} dr = \frac{d\pi^{\frac{d}{2}}}{V_1 \Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} \int_0^\infty r^d e^{-\frac{r^d}{r_1^d}} dr \\ &= \frac{d\pi^{\frac{d}{2}}}{V_1 \Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} \int_0^\infty r \cdot \frac{r_1^d}{d} \cdot \frac{dr^{d-1}}{r_1^d} \cdot e^{-\frac{r^d}{r_1^d}} dr = \int_0^\infty r_1 t^{\frac{1}{d}} \cdot e^{-t} dt \end{aligned} \quad (4-24)$$

(4-13)式で表される Γ 関数を用いると、上式は次のように変形される。

$$\int_0^\infty r_1 t^{\frac{1}{d}} \cdot e^{-t} dt = r_1 \Gamma\left(\frac{1}{d} + 1\right) \quad (4-25)$$

ところで、 r_1 は(4-17)式より、次式で表される。

$$r_1 = \left(\frac{\pi^{\frac{d}{2}} N}{\Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} \right)^{-\frac{1}{d}} \quad (4-26)$$

以上より、 d 次元球における最近接距離の期待値 s は、次式で与えられる。

$$s = \left(\frac{\pi^{\frac{d}{2}} N}{\Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} \right)^{-\frac{1}{d}} \Gamma\left(\frac{1}{d} + 1\right) \quad (4-27)$$

上式の d に3を代入したとき、(4-14)式と同じ結果が得られることが確認される。

そこで、これまでの検討を踏まえて、Götzのモデルを次のように修正する。

$$E_A(N_A^-) = E_{A,0} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon S} \quad (4-28)$$

$$s = \left(\frac{4\pi}{3} N \right)^{-\frac{1}{3}} \Gamma\left(\frac{4}{3}\right) \quad (4-29)$$

4.2.3. イオン化率を考慮した Götz のモデル

Götz のモデルは活性化エネルギーの実験値をよく再現するとされている。なお、Götz のモデルが使われるとき、多くの場合 100% のイオン化率が仮定されている。しかし、実際は、Götz の式から計算される活性化エネルギーはイオン化率(イオン化アクセプタ密度)に依存して変化するため、活性化エネルギーの変化は自己無撞着に解く必要がある。そこで、次の計算手順に従って、イオン化率を考慮した活性化エネルギーの計算を行う。

1. イオン化率 K を仮定する。
2. 仮定したイオン化率を用いて活性化エネルギーを算出する。
3. 得られた活性化エネルギーを用いて、電荷中性条件からフェルミ準位を求める。
4. 得られたフェルミ準位から改めてイオン化率を計算する。
5. 自己無撞着な解が得られるまで 1-4 の計算を繰り返す。

以下、計算方法について詳述する。

イオン化率が K のとき、イオン化アクセプタの最近接距離の期待値 s は次式で与えられる。

$$s = \Gamma\left(\frac{4}{3}\right) \left(\frac{4\pi}{3} \cdot KN\right)^{-\frac{1}{3}} \quad (4-30)$$

Götz のモデルを用いると、このときの活性化エネルギー E_A の値は次式で表される。

$$E_A = E_{A,0} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon s} \quad (4-31)$$

ここで得られる活性化エネルギーを用いて、フェルミ準位の計算を行う。アクセプタのみがドーピングされた状況を考える。価電子帯から伝導帯への励起が無視できるとき、次式が成り立つ。

$$p = N_A^- \quad (4-32)$$

ここで、 p は正孔濃度、 N_A^- はイオン化アクセプタ濃度である。また、正孔濃度、イオン化アクセプタ濃度はフェルミ準位 E_f 、活性化エネルギー E_A を用いて、それぞれ次式で記述される。

$$p = N_V \left(1 - \frac{1}{1 + e^{\frac{E_V - E_f}{k_b T}}} \right) = N_V \left(\frac{1}{1 + e^{\frac{E_f - E_V}{k_b T}}} \right) \quad (4-33)$$

$$N_A^- = \frac{N_A}{1 + g e^{\frac{E_A - E_f}{k_b T}}} \quad (4-34)$$

$p = N_A^-$ であるから、

$$N_V \left(\frac{1}{1 + e^{\frac{E_f - E_V}{k_b T}}} \right) = \frac{N_A}{1 + g e^{\frac{E_A - E_f}{k_b T}}} \quad (4-35)$$

分母を払うと、

$$N_V + g N_V e^{\frac{E_A}{k_b T}} e^{\frac{E_f}{k_b T}} = N_A + N_A e^{-\frac{E_V}{k_b T}} e^{\frac{E_f}{k_b T}} \quad (4-36)$$

両辺に $\exp(E_f/k_b T)$ を乗じて整理すると、次の式が得られる。

$$N_A e^{-\frac{E_V}{k_b T}} e^{\frac{2E_f}{k_b T}} + (N_A - N_V) e^{\frac{E_f}{k_b T}} - g N_V e^{\frac{E_A}{k_b T}} = 0 \quad (4-37)$$

解の公式より、

$$e^{\frac{E_f}{k_b T}} = \frac{1}{2 N_A e^{-\frac{E_V}{k_b T}}} \left\{ -(N_A - N_V) + \sqrt{(N_A - N_V)^2 + 4 g N_A N_V e^{\frac{E_A - E_V}{k_b T}}} \right\} \quad (4-38)$$

ここで、価電子帯の上端のエネルギーを基準(0)にとり、 E_f について解くと、

$$E_f = k_b T \ln \left(\frac{N_V}{2 N_A} - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\left(1 - \frac{N_V}{N_A} \right)^2 + 4 g \frac{N_V}{N_A} e^{\frac{E_A}{k_b T}}} \right) \quad (4-39)$$

となる。上式の E_f を(4-33)式に代入することによって正孔濃度(イオン化率)を得ることが出来る。上記の計算を自己無撞着な解が得られるまで反復することによって、活性化エネルギーを算出することができる。

上述の計算により、GaN における活性化エネルギーのアクセプタ濃度依存性について計算を行った。計算では、孤立アクセプタの活性化エネルギーを 170、220 meV としたときのそれぞれの活性化エネルギーのアクセプタ濃度依存性を算出した。得られた計算結果を図 4-2 に示す。また、図 4-2 には GaN の活性化エネルギーの報告値も合わせて載せている [69,71,80-88,72-79]。図から明らかなように、イオン化率を考慮したとき、活性化エネルギーの計算値と実験値の乖離が大きく、高濃度化による活性化エネルギーの減少を過少評価する結果となった。

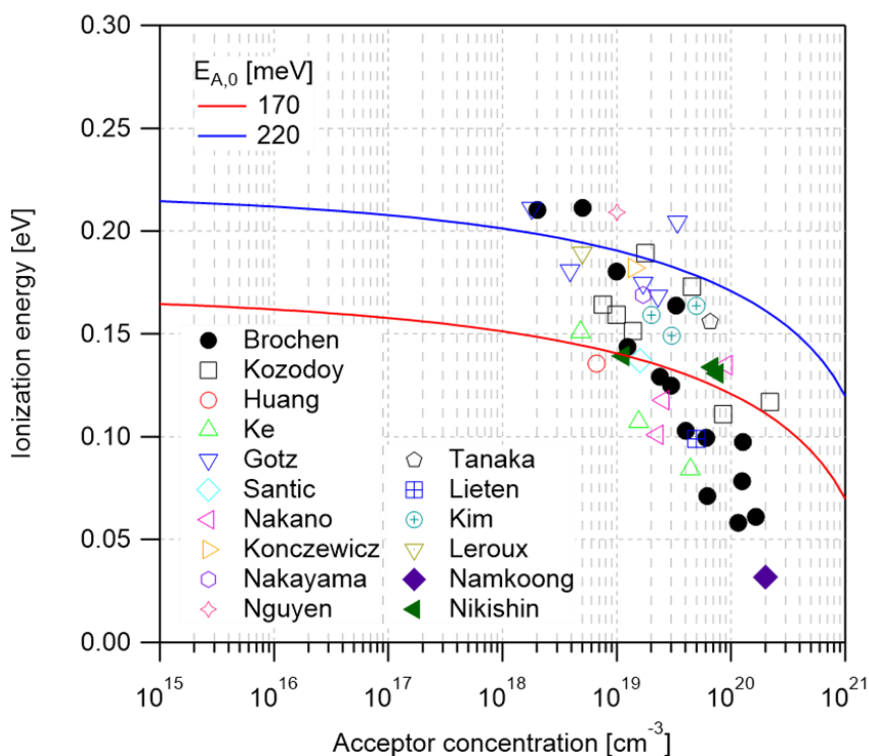


図 4-2 イオン化率を考慮した活性化エネルギーのアクセプタ濃度依存性

4.3. 新規モデルの検討

4.3.1. 高濃度化に伴う活性化エネルギーの減少

新規モデルの検討に先んじて、ドーパントの高濃度化に伴う活性化エネルギーの減少に

ついて検討する。高濃度化に伴う活性化エネルギーの減少機構について次のふたつの効果が考えられる。

第一に、遮蔽による基底準位エネルギーの上昇が考えられる(図 4-3)。ドーパントのポテンシャルは、自らが生み出したキャリアによって遮蔽されるため、クーロンポテンシャルの及ぶ範囲は狭まる。この遮蔽されたポテンシャルは湯川ポテンシャルとも呼ばれ、次式で表される。

$$V = \frac{q}{4\pi\epsilon r} e^{-\frac{r}{\lambda}} \quad (4-40)$$

ここで、 q は電気素量、 ϵ は誘電率、 λ は遮蔽長である。遮蔽長 λ は次式で与えられる。

$$\lambda = \sqrt{\frac{\epsilon k_b T}{q^2 n}} \quad (4-41)$$

ここで、 k_b はボルツマン定数、 T は温度、 n はキャリア密度である。

ドーパントの高濃度化に伴いキャリア密度が増大すると、ポテンシャルの遮蔽が顕著になる。これに伴って、基底準位のエネルギーが上昇するため、活性化エネルギーは減少する。

第二に、隣接したドーパント間のクーロンポテンシャルの重なるの効果が考えられる。ドーピング濃度が高くなると、ドーパント原子間の平均距離が短くなるため、隣り合うドーパント原子のクーロンポテンシャルが重なるようになる。このとき、図 4-4 に示すようにイオン化に要するエネルギーは減少する。さらに、隣接するドーパント原子の間隔が、有効ボア半径よりも小さくなると、キャリアのイオン化に対するバリアがなくなるため金属的な振る舞いを示すようになる(Mott 遷移)。

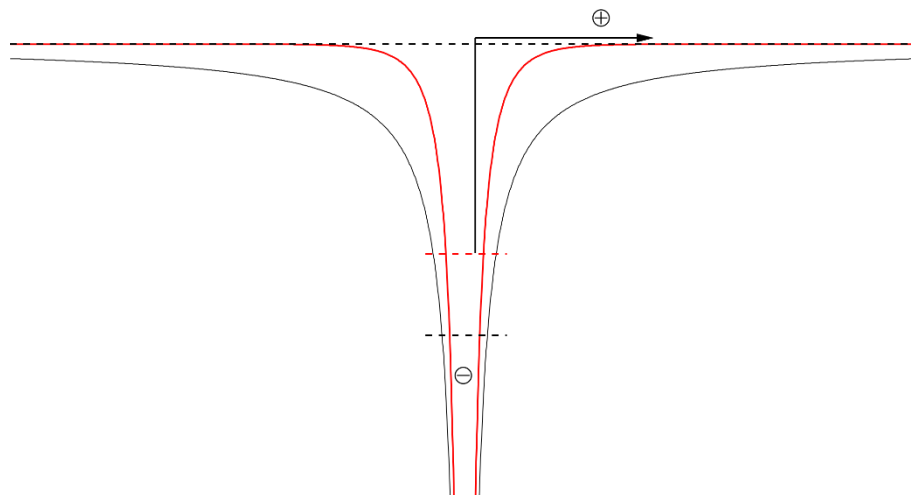


図 4-3 遮蔽されたクーロンポテンシャル

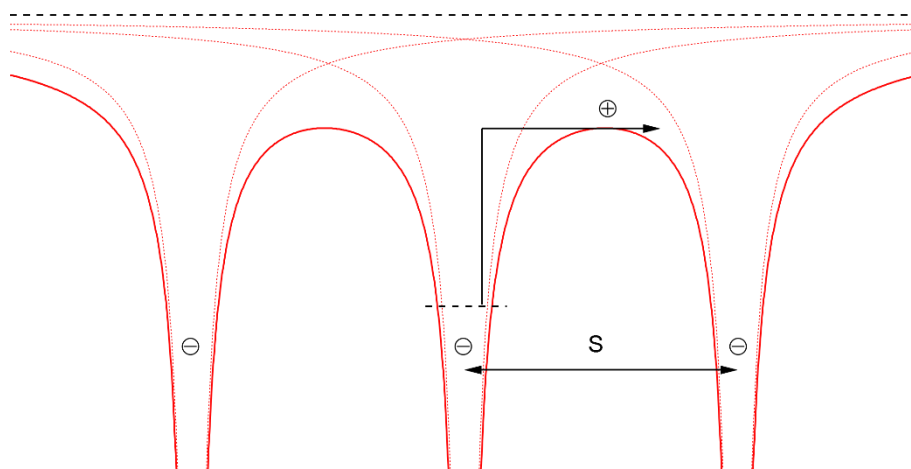


図 4-4 クーロンポテンシャルの重なり

これらの効果を考慮して新たなモデルの構築を目指す。ここでは、下記の4つのモデルについて検討する。

第一に、遮蔽による基底準位のエネルギーの上昇のみを考慮したモデル。第二に、クーロンポテンシャルの重なりのみを考慮したモデル。第三に、それら両方の効果を考慮したモデル。第四に、中間準位を考慮したモデルについて検討する。それぞれの計算モデルにおける活性化エネルギーの値を図 4-5 にまとめる。最後の中間準位を考慮したモデルの詳細につ

いては後で述べる。

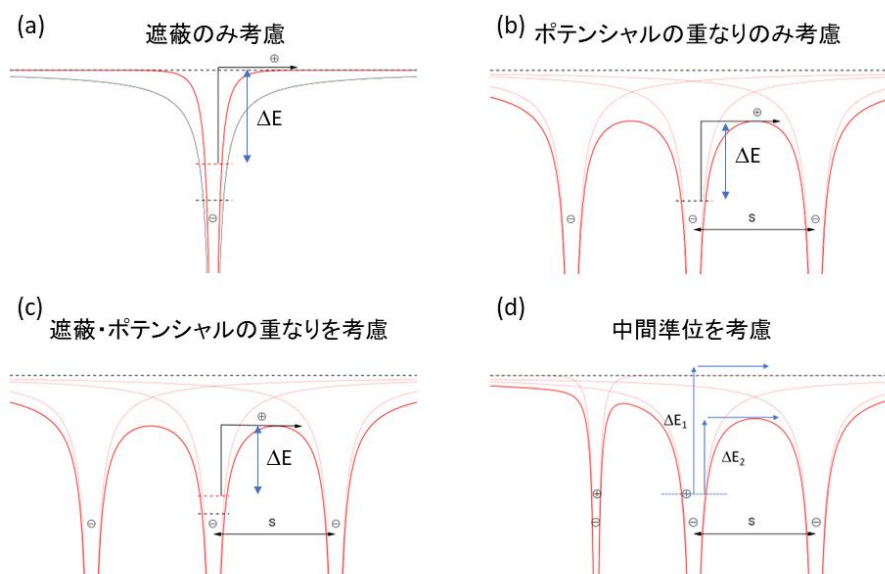


図 4-5 各計算モデルの比較

4.3.2. 遮蔽を考慮したモデル

ドーパントのポテンシャルは、自らが生み出したキャリアによって遮蔽されるため、クーロンポテンシャルの及ぶ範囲は狭まる。このときの遮蔽されたポテンシャルを次に再掲する。

$$V = \frac{q^2}{4\pi\epsilon r} e^{-\frac{r}{\lambda}} \quad (4-42)$$

ここで、 q は電気素量、 ϵ は誘電率、 λ は遮蔽長である。

価電子帯から伝導帯への励起が無視できるとき、遮蔽に寄与する正孔密度とイオン化アクセプタ濃度は等しい。したがって、イオン化率を K とすると、遮蔽に寄与するキャリア密度は KN である。したがって、遮蔽長 λ は次式で与えられる。

$$\lambda = \sqrt{\frac{\epsilon k_b T}{q^2 KN}} \quad (4-43)$$

ここで、 k_b はボルツマン定数、 T は温度、 N はアクセプタ密度である。

この遮蔽により、基底状態のエネルギーが上昇するため、イオン化に要する活性化エネルギーは減少する。遮蔽長が λ のときの活性化エネルギー E_{im} は次式により計算される[89]。

$$E_{im} = E_{im0} \left(1 - \left(\frac{a}{\lambda} \right)^2 \right) e^{-\frac{2a}{\lambda}} \quad (4-44)$$

$$a = a_0 \left(1 + \frac{a}{\lambda} \right)^{-1} e^{\frac{a}{\lambda}} \quad (4-45)$$

ここで、 a_0 、 E_{im0} は次式で与えられるボーアモデルにおける有効ボーア半径とイオン化エネルギーである。また、 a は遮蔽長が λ のときの有効ボーア半径である。

$$E_{im0} = \frac{q^4 m}{8 h^2 \epsilon^2} \quad (4-46)$$

$$a_0 = \frac{h^2 \epsilon}{\pi q^2 m} \quad (4-47)$$

なお、(4-44)式は解析的には解けないため、数値計算により E_A を算出する。また、本計算においては、孤立アクセプタのイオン化エネルギー E_{im0} は 170、220 meV と仮定してそれぞれの場合について計算を行った。

以降の計算はイオン化率を考慮した Götze のモデル(894.2.3)と同じ手続きであるため詳細は割愛する。

上述の計算により、GaN における活性化エネルギーのアクセプタ濃度依存性について計算を行った。得られた計算結果を図 4-6 に示す。また、図 4-6 には GaN の活性化エネルギーの報告値も合わせて載せている。図から明らかなように、活性化エネルギーの計算値と実験値の乖離が大きく、高濃度化による活性化エネルギーの減少を過少評価する結果となった。

GaN 結晶における Mg の活性化エネルギーは高く、高濃度条件においても遮蔽に寄与するキャリア密度が上がりきらないため、計算上の活性化エネルギーはアクセプタ密度に対し鈍感な振る舞いを示した。

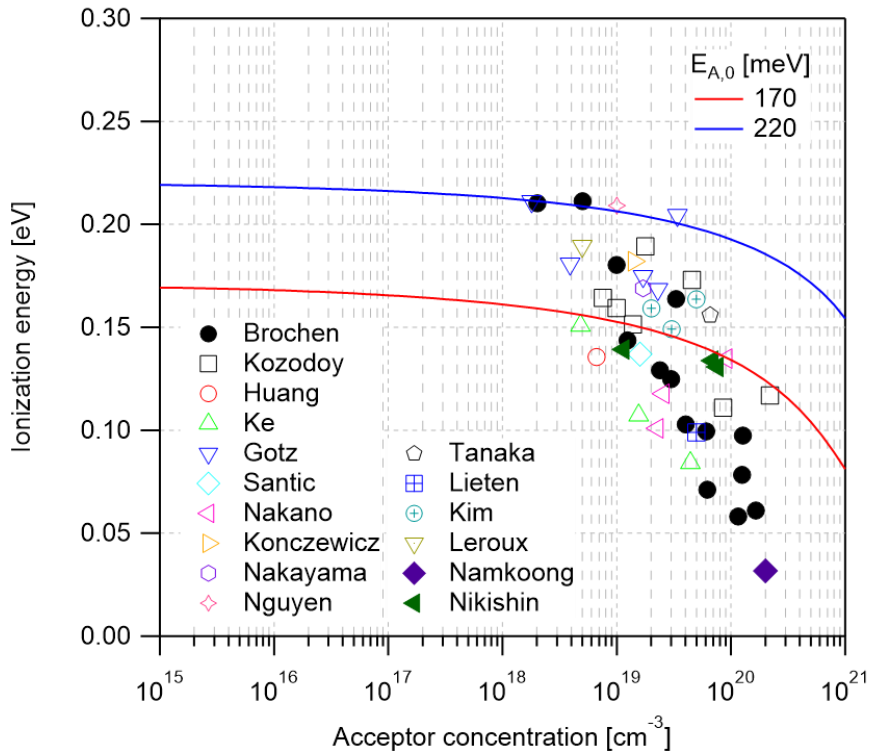


図 4-6 遮蔽のみを考慮した活性化エネルギーのアクセプタ濃度依存性

4.3.3. クーロンポテンシャルの重なりを考慮したモデル

ドーピング濃度が高くなると、ドーパント原子間の平均距離が短くなるため、隣り合うドーパント原子のクーロンポテンシャルが重なるようになる。このとき、図 4-4 に示されるようにイオン化に要するエネルギーは減少する[90,91]。

アクセプタ濃度を N 、アクセプタのイオン化率を K とする。着目するアクセプタを原点にとり、これと最近接のイオン化アクセプタのみを考慮する。このとき、着目するアクセプタと最近接のイオン化アクセプタ間の電位プロファイル Φ は次式で与えられる。

$$\Phi = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon} \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{s-r} \right) \quad (4-48)$$

ここで、 s はイオン化アクセプタの最近接距離の期待値であり、イオン化率 K を用いて次式で表される。

$$s = \Gamma \left(\frac{4}{3} \right) \left(\frac{4\pi}{3} KN \right)^{-\frac{1}{3}} \quad (4-49)$$

ポテンシャルの対称性から、距離 $s/2$ の位置で極大値を迎えるため、このときの活性化エネルギーの変化量 ΔE は次式で与えられる。

$$\Delta E = \Phi\left(\frac{s}{2}\right) = -\frac{q^2}{\pi\epsilon s} \quad (4-50)$$

したがって、活性化エネルギーの値 E_A は次式で与えられる。

$$E_A = E_{A,0} - \frac{q^2}{\pi\epsilon s} \quad (4-51)$$

このときの活性化エネルギーの表式は Götze のモデルと 4 倍の因子だけ異なっている。

上述の計算により、GaN における活性化エネルギーのアクセプタ濃度依存性について計算を行った。得られた計算結果を図 4-7 に示す。図から明らかなように、活性化エネルギーの計算値と実験値の乖離が大きく、高濃度化による活性化エネルギーの減少を過大評価する結果となった。

ここでは、ポテンシャルの遮蔽の効果を考慮していないため、クーロンポテンシャルの重なるの効果を過大評価したものと考えられる。実際には、不純物ポテンシャルは自らが生み出したキャリアにより遮蔽される。この遮蔽により、クーロンポテンシャルの及ぶ領域が狭められるため、クーロンポテンシャルの重なるの効果は小さくなる。

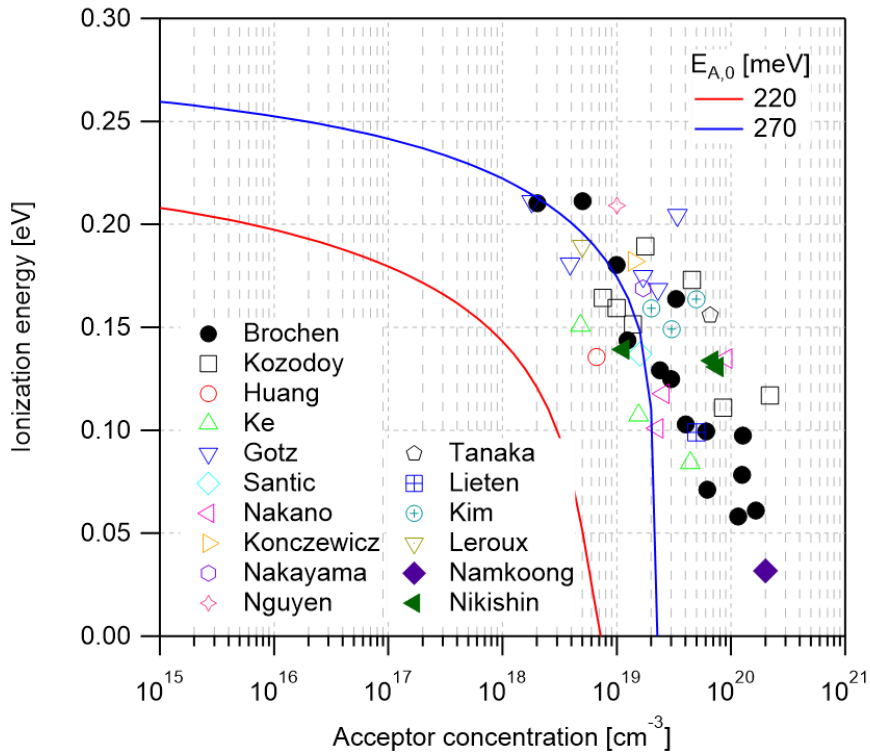


図 4-7 ポテンシャルの重なりを考慮した活性化エネルギーのアクセプタ濃度依存性

4.3.4. 遮蔽・クーロンポテンシャルの重なりを考慮したモデル

続いて、遮蔽、クーロンポテンシャルの重なりを考慮したモデルを用いて活性化エネルギーのアクセプタ濃度依存性の計算を行う。

アクセプタ濃度を N 、アクセプタのイオン化率を K とする。着目するアクセプタを原点にとり、これと最近接のアクセプタのみを考慮する。このときの着目するアクセプタと最近接のイオン化アクセプタ間の電位プロファイル Φ は次式で与えられる。

$$\Phi = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon} \left(\frac{e^{-\frac{r}{\lambda}}}{r} + \frac{e^{-\frac{s-r}{\lambda}}}{s-r} \right) \quad (4-52)$$

ここでは、遮蔽を考慮して、湯川型のポテンシャルを用いて計算している。 s はイオン化アクセプタの最近接距離の期待値、 λ は遮蔽長である。

ポテンシャルの対称性から、距離 $s/2$ の位置で極大値を迎えるため、このときの活性化エネルギーの変化量 ΔE は次式で与えられる。

$$\Delta E = \Phi\left(\frac{s}{2}\right) = -\frac{q^2}{\pi\epsilon S} \cdot e^{-\frac{s}{2\lambda}} \quad (4-53)$$

したがって、遮蔽を考慮した活性化エネルギー E_{im} 、クーロンポテンシャルの重なりによる活性化エネルギーの減少分 ΔE を用いて、遮蔽・クーロンポテンシャルの重なりを考慮したときの活性化エネルギーの値 E_A は次式で与えられる。

$$E_A = E_{im} - \frac{q^2}{\pi\epsilon S} \cdot e^{-\frac{s}{2\lambda}} \quad (4-54)$$

上述の計算により、GaNにおける活性化エネルギーのアクセプタ濃度依存性について計算を行った。得られた計算結果を図 4-8 に示す。本モデルを用いることで、活性化エネルギーのアクセプタ濃度依存性の実験値を比較的よく再現する結果が得られた。

ここでは、ポテンシャルの遮蔽を考慮したため、クーロンポテンシャルの重なりの影響が制限されている。これにより、クーロンポテンシャルの重なりのみを考慮したモデルと比較して、アクセプタ濃度に対してより緩やかな変化を示す結果となった。また、クーロンポテンシャルの重なりを考慮しているため、遮蔽に寄与するキャリア密度は遮蔽のみを考慮したモデルと比較して増加しているため、遮蔽による基底状態のエネルギーの上昇分もまた増加している。したがって、遮蔽・クーロンポテンシャルの重なりをふたつを考慮することによって、どちらか一方のみを考慮したモデルの中間的な振る舞いを示す結果となった。

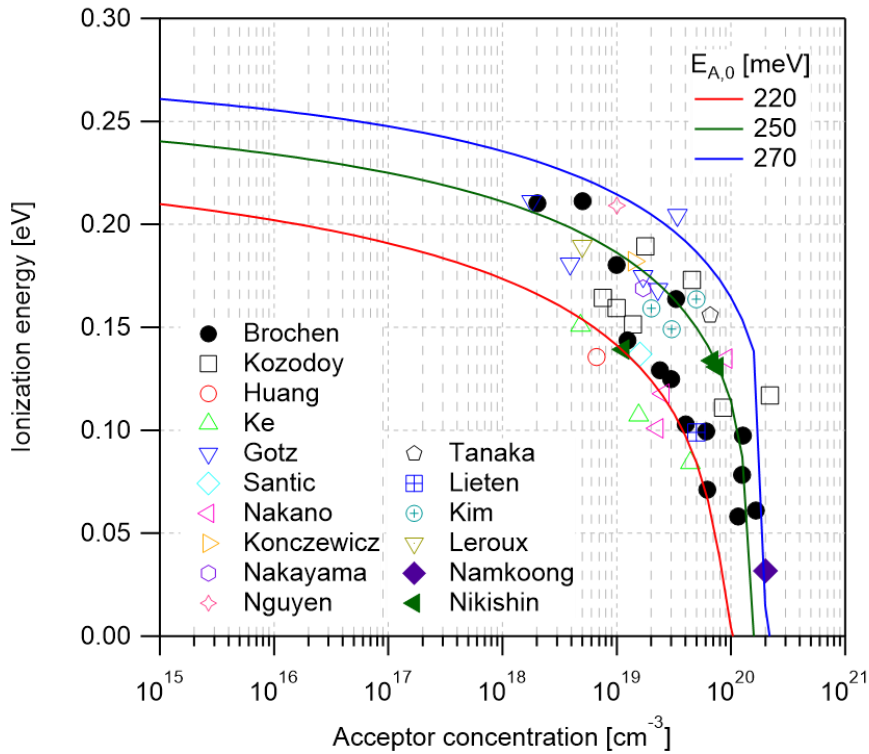


図 4-8 遮蔽・ポテンシャルの重なりを考慮した活性化エネルギーのアクセプタ濃度依存性

4.3.5. 中間準位を考慮したモデル

4.3.5.1. 不純物半導体における電気伝導

これまで、遮蔽のみを考慮したモデル、クーロンポテンシャルの重なりのみを考慮したモデル、遮蔽・クーロンポテンシャルの重なりを考慮したモデルについて検討を行った。

なお、実際には、遮蔽のみを考慮したモデルにおける活性化エネルギーと、クーロンポテンシャルの重なりを考慮した活性化エネルギーは異なる物理的な意味をもつと考えられる。

不純物半導体における電気伝導には次の2種類の過程が考えられる(図 4-9)。第一に、ドーパントに束縛されたキャリアが母材のバンドに励起されて伝導するバンド伝導。第二に、ドーパントに束縛されたキャリアがイオン化ドーパントを介して伝導する不純物伝導。それぞれの伝導における活性化エネルギーを ΔE_1 、 ΔE_2 とすると、遮蔽のみを考慮したモデルではバンド伝導のみを、クーロンポテンシャルの重なりのみを考慮したモデル、遮蔽・クーロンポテンシャルの重なりを考慮したモデルでは不純物伝導のみを考慮していることになる。なお、不純物伝導については専用の分布関数、状態密度を用いた計算を行う必要があるため、 ΔE_2 の位置に新しいバンド端が存在するとみなす従来のモデルは不適切であると思わ

れる。

そこで、バンド伝導、不純物伝導をそれぞれ切り分けた計算を行うことにする。ここでは、 ΔE_2 に対応する位置に仮想的な準位(中間準位)が存在すると仮定し、価電子帯、中間準位に存在する正孔をモバイルなキャリアとみなすことにする。

ここで、改めて高濃度化に伴う活性化エネルギーの変化について考える。遮蔽による基底状態のエネルギーの上昇は ΔE_1 、 ΔE_2 のそれぞれの活性化エネルギーを減少させる。一方、クーロンポテンシャルの重なりによる活性化エネルギーの減少は ΔE_2 のみを減少させる。これらふたつの効果を考慮して、活性化エネルギーのアクセプタ濃度依存性の計算を行う。

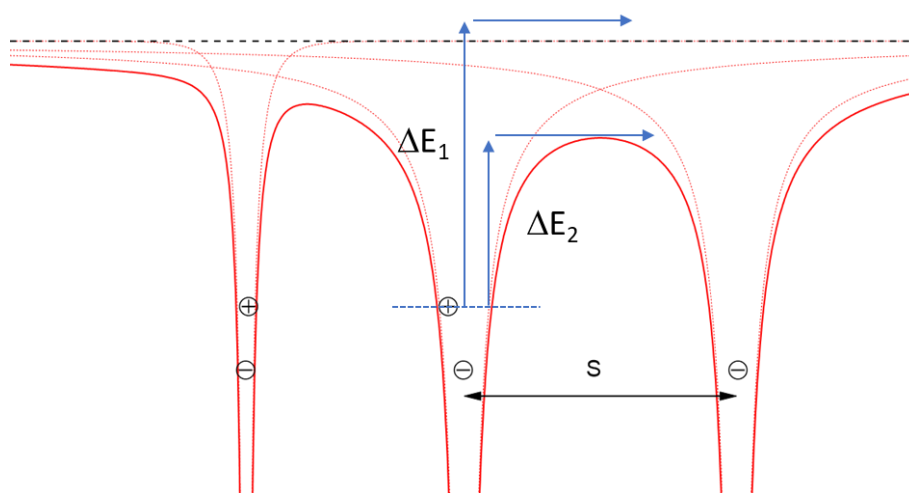


図 4-9 中間準位を考慮したモデル

4.3.5.2. 分布関数の検討

まず、中間準位を考慮したときの分布関数について検討を行う。

アクセプタ準位、中間準位を着目する系に選び、価電子帯をリザーバーとみなし、グランドカノニカル分布を適用する。この系のある微視的状态 i におけるエネルギーを E_i 、粒子数を N_i とすると、この微視的状态 i が出現する確率 p は次式で与えられる。

$$p = \frac{1}{\Xi} e^{-\frac{E_i - \mu N_i}{k_b T}} \quad (4-55)$$

ここで、 k_b はボルツマン定数、 T は温度、 μ は化学ポテンシャルである。 i は系のある微視的状态を指定するインデックスであり、 E_i 、 N_i は微視的状态 i に対応するエネルギーと粒子数

である。Ξは大分配関数であり、次式で与えられる。

$$\Xi = \sum_i e^{-\frac{E_i - \mu N_i}{k_b T}} \quad (4-56)$$

大分配関数は、すべての微視的状態を数えあげて、上の計算を行うことで得られる。

ここで考えている中間準位は、最近接のイオン化アクセプタに対応するものであるため、通常のアクセプタ準位と同様に取り扱うことにする。アクセプタは共有結合を形成する電子がひとつ不足しているため、他から電子を受け取ることができる。また、アクセプタ準位が空の状態は、共有結合に携わる電子を取り除くことに対応するため、アクセプタ準位が空になることはない。したがって、アクセプタ準位、中間準位が取り得る状態は電子がひとつ、あるいは反対向きのスピンを有するふたつの電子が存在している状態のふたつのみである。また、正孔はアクセプタ準位、中間準位、価電子帯のいずれかに存在するものとする。さらに、アクセプタ準位、中間準位の両方において、重い正孔と軽い正孔のふたつのバンドの縮退を考慮する。

これらの条件を満たす状態を表 4-1 にまとめる。また、各状態に対応する正孔位置を図 4-10 に示す。ここで、アクセプタ準位のエネルギーを E_a 、中間準位のエネルギーを E_m とした。

状態 1 は価電子帯に正孔が供給されている状態を、状態 2-5 は中間準位に正孔が供給されている状態を、状態 6-9 は正孔がアクセプタに束縛されている状態を示す。したがって、状態 1-5 がアクセプタ準位がイオン化されている状態に対応する。

以上より、次の大分配関数が得られる。

$$\Xi = e^{-\frac{2E_a + 2E_m - 4\mu}{k_b T}} + 4e^{-\frac{(2E_a + E_m - 3\mu)}{k_b T}} + 4e^{-\frac{E_a + 2E_m - 3\mu}{k_b T}} \quad (4-57)$$

したがって、アクセプタがイオン化している確率(状態 1-5)、価電子帯に正孔が供給されている確率(状態 1)はそれぞれ次のように計算される。

$$\frac{p_{1-5}}{\Xi} = \frac{e^{-\frac{2E_a + 2E_m - 4\mu}{k_b T}} + 4e^{-\frac{2E_a + E_m - 3\mu}{k_b T}}}{e^{-\frac{2E_a + 2E_m - 4\mu}{k_b T}} + 4e^{-\frac{2E_a + E_m - 3\mu}{k_b T}} + 4e^{-\frac{E_a + 2E_m - 3\mu}{k_b T}}} = \frac{1 + 4e^{-\frac{E_m - \mu}{k_b T}}}{1 + 4e^{-\frac{E_m - \mu}{k_b T}} + 4e^{-\frac{E_a - \mu}{k_b T}}} \quad (4-58)$$

$$\frac{p_1}{\Xi} = \frac{e^{-\frac{2E_a + 2E_m - 4\mu}{k_b T}}}{e^{-\frac{2E_a + 2E_m - 4\mu}{k_b T}} + 4e^{-\frac{2E_a + E_m - 3\mu}{k_b T}} + 4e^{-\frac{E_a + 2E_m - 3\mu}{k_b T}}} = \frac{1}{1 + 4e^{-\frac{E_m - \mu}{k_b T}} + 4e^{-\frac{E_a - \mu}{k_b T}}} \quad (4-59)$$

表 4-1 アクセプタ準位・中間準位のすべての微視的状态

状態の番号	アクセプタ準位	中間準位	E	N
1	2 電子存在	2 電子存在	$2E_a+2E_m$	4
2	2 電子存在	1 電子のみ存在(↑ HH)	$2E_a+E_m$	3
3	2 電子存在	1 電子のみ存在(↓ HH)	$2E_a+E_m$	3
4	2 電子存在	1 電子のみ存在(↑ LH)	$2E_a+E_m$	3
5	2 電子存在	1 電子のみ存在(↓ LH)	$2E_a+E_m$	3
6	1 電子のみ存在(↑ HH)	2 電子存在	E_a+2E_m	3
7	1 電子のみ存在(↓ HH)	2 電子存在	E_a+2E_m	3
8	1 電子のみ存在(↑ LH)	2 電子存在	E_a+2E_m	3
9	1 電子のみ存在(↓ LH)	2 電子存在	E_a+2E_m	3

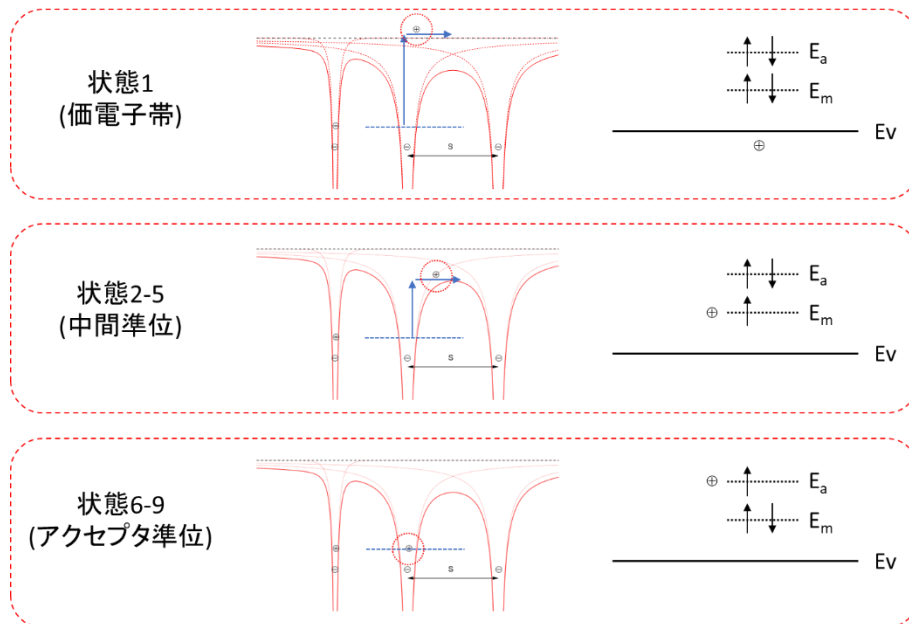


図 4-10 各状態に対応する正孔位置

4.3.5.3. イオン化率の算出

前項の分布関数を用いて、フェルミ準位、及び、イオン化率の計算を行う。

適当なイオン化率 K を仮定することにより、アクセプタ準位のエネルギー E_a 、中間準位のエネルギー E_m が求められる。計算手順は次の通りである。

1. イオン化率 K_1 、 K_2 を仮定する。
2. 仮定したイオン化率を用いて活性化エネルギー ΔE_1 、 ΔE_2 を算出する。
3. 得られた活性化エネルギーを用いて、電荷中性条件からフェルミ準位を求める。
4. 得られたフェルミ準位から改めてイオン化率を計算する。
5. 自己無撞着な解が得られるまで 1-4 の計算を繰り返す。

イオン化アクセプタ濃度に依存して活性化エネルギーが変化するため、あるイオン化率を仮定し反復計算を行うことで、自己無撞着な解を求める必要がある。イオン化の経路はバンド伝導と不純物伝導のふたつがあるため、それぞれの経路によりイオン化した割合を K_1 、 K_2 とする。

バンド伝導に対する活性化エネルギー ΔE_1 、不純物伝導に対する活性化エネルギー ΔE_2 はそれぞれ、先の計算と同様にして求められるため、ここでは、計算の詳細は割愛する。

続いて、求めた ΔE_1 、 ΔE_2 を用いて、電荷中性条件からフェルミ準位を求める。図 4-11 に示されるように、価電子帯の上端を基準にとると、アクセプタ準位 E_a と中間準位 E_m のエネルギーは次式で表される。

$$E_a = \Delta E_1 \quad (4-60)$$

$$E_m = E_a + \Delta E_2 \quad (4-61)$$

イオン化アクセプタ密度は中間準位の正孔密度と価電子帯の正孔密度の和に等しい。また、価電子帯の正孔濃度は次式で表される。

$$p = N_v \frac{1}{1 + e^{\frac{E_f}{k_B T}}} \quad (4-62)$$

したがって、先の分布関数を用いると、次式が成り立つ。

$$N_A \frac{1}{1 + 4e^{\frac{E_a - E_f}{k_B T}} + 4e^{\frac{E_m - E_f}{k_B T}}} = N_v \frac{1}{1 + e^{\frac{E_f}{k_B T}}} \quad (4-63)$$

上式をフェルミ準位について解くと、次の式が得られる。

$$E_f = k_b T \ln \left\{ \frac{N_v}{2N_A} - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\left(1 - \frac{N_v}{N_A}\right)^2 + 16 \frac{N_v}{N_A} \left(e^{\frac{E_a}{k_b T}} + e^{\frac{E_m}{k_b T}} \right)} \right\} \quad (4-64)$$

したがって、あるイオン化率を仮定することで、アクセプタ準位のエネルギー E_a 、中間準位のエネルギー E_m 、フェルミ準位 E_f が求められる。ここまでの計算で得られた値を用いて改めてイオン化率を計算することができる。イオン化率 K は次式で計算される。

$$K = \frac{N_A^-}{N_A} = \frac{1 + 4e^{\frac{E_m - E_f}{k_b T}}}{1 + 4e^{\frac{E_m - E_f}{k_b T}} + 4e^{\frac{E_a - E_f}{k_b T}}} \quad (4-65)$$

上記の計算を自己無撞着な解が得られるまで反復することで、バンド伝導、不純物伝導における活性化エネルギー、及び、イオン化率を計算することが可能である。

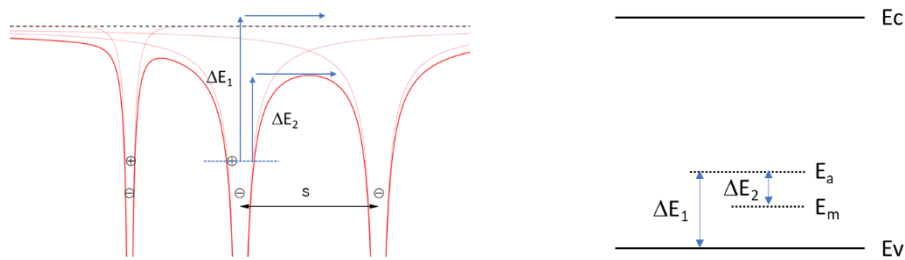


図 4-11 活性化エネルギーとバンドダイアグラムの模式図

4.3.5.4. 実験値との比較

中間準位を考慮したモデルを用いて、GaN における活性化エネルギーのアクセプタ濃度依存性の計算を行った。得られた結果を図 4-12 に示す。図中の ΔE_1 (実線)はバンド伝導の活性化エネルギーを、 ΔE_2 (破線)は不純物伝導の活性化エネルギーを示している。 ΔE_1 、 ΔE_2 はいずれもイオン化アクセプタ濃度の増加に伴い減少する。したがって、いずれにおいてもアクセプタ濃度の増加に伴い加速度的に活性化エネルギーが減少する。

ΔE_1 、 ΔE_2 のそれぞれの挙動についてより詳細に確認する。

ΔE_2 はアクセプタ濃度の増加に伴い加速度的に減少し、アクセプタ濃度が 10^{19} cm^{-3} 以上の

高濃度条件において、不純物伝導に対するバリアが消失し、アクセプタの完全イオン化が達成される結果となっている。

ΔE_1 もアクセプタ濃度の増加に伴い加速度的に減少するが、減少レートは ΔE_2 と比較すると小さい。なお、 ΔE_2 が0に向けて急激に減少するアクセプタ濃度領域で遮蔽に寄与するキャリア密度が著しく増加するため、その領域においては ΔE_1 も急激な減少を示す。 ΔE_2 が0に接近し、100%に近いイオン化率が達成されると、加速度的な変化は生じなくなるため、 ΔE_1 はアクセプタ濃度に対して、単調な変化を示すことになる。

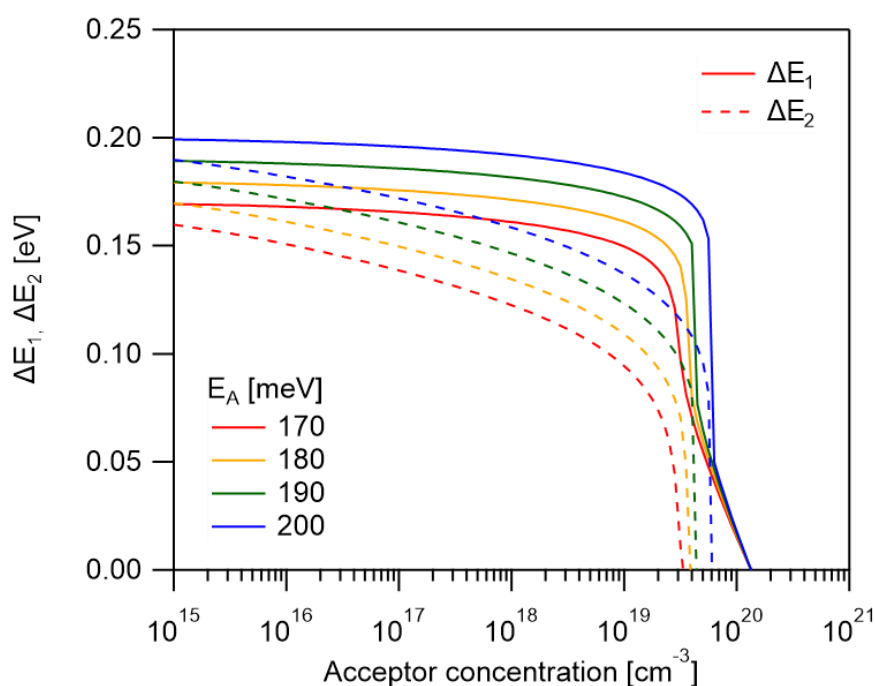


図 4-12 中間準位を考慮した活性化エネルギーのアクセプタ濃度依存性

中間準位を考慮したモデルを用いて計算した活性化エネルギーのアクセプタ濃度依存性と報告値との比較を図 4-13 に示す。図には、不純物伝導に対する活性化エネルギー ΔE_2 を示した。図より、中間準位を考慮したモデルを用いることで、比較的良好に活性化エネルギーの報告値が再現されていることが確認される。

以降、ここで示した中間準位を考慮したモデルをベースに用いて、アクセプタ濃度・電界強度依存を考慮したイオン化率の計算を行う。

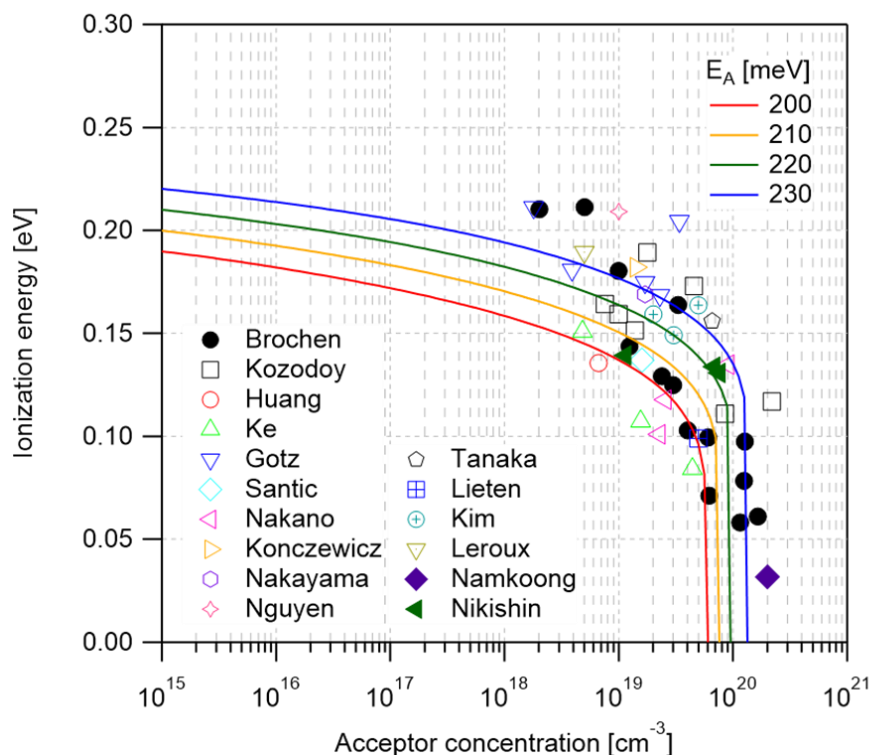


図 4-13 活性化エネルギーのアクセプタ濃度依存性の文献値との比較

4.4. プール・フレンケル効果の検討

4.4.1. プール・フレンケル効果

電界の存在によってイオン化の活性化エネルギーが減少することが知られている。図 4-14 に電界印加時の不純物ポテンシャルを示す。図中の E_0 は電界が存在しないときの活性化エネルギーを、 ΔE は電界が印加されたことによる活性化エネルギーの変化分を示している。電界が印加されることによって、電界方向に沿ってポテンシャルが変化する。これにより、電界方向に沿って極値をもつポテンシャル障壁が生じる。このポテンシャル障壁が電界印加時におけるイオン化の活性化エネルギーを与えるため、電界の存在によりキャリアのイオン化が容易になる。

AlGaIn 結晶において、アクセプタとして用いられる Mg の活性化エネルギーは高く、シミュレーション計算上は注入効率の向上に寄与し得るイオン化 Mg 濃度を得ることは困難という結果が得られた。なお、シミュレーション計算では、活性化エネルギーのアクセプタ濃度依存性と電界強度依存性を考慮していない。コア/クラッド層界面近傍には、巨大な正の分極電荷により、3.9 MV/cm 程度の非常に強力な電界が生じている。この強力な界面電界により、活性化エネルギーが減少することが期待される。

本節では、先に示した中間準位を考慮したモデルをベースとし、電界が印加されたときのイオン化率の計算を行う。

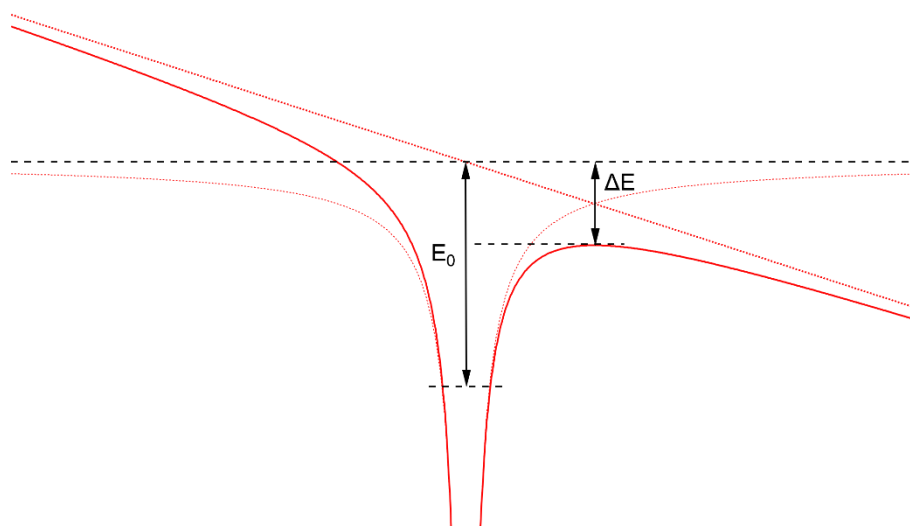


図 4-14 電界印加時の不純物ポテンシャルと活性化エネルギーの減少

4.4.2. イオン化率の計算

中間準位を考慮したモデルをベースとし、電界印加時のイオン化率の計算を行う。一部繰り返しを伴うが、計算の詳細を以下に示す。

1. イオン化率 K_1 、 K_2 を仮定する。
2. 仮定したイオン化率を用いて活性化エネルギー ΔE_1 、 ΔE_2 を算出する。
3. 得られた活性化エネルギーを用いて、電荷中性条件からフェルミ準位を求める。
4. 得られたフェルミ準位から改めてイオン化率を計算する。
5. 自己無撞着な解が得られるまで 1-4 の計算を繰り返す。

イオン化アクセプタ濃度に依存して活性化エネルギーが変化するため、あるイオン化率を仮定し、反復計算を行うことで自己無撞着な解を求める必要がある。イオン化の経路はバンド伝導と不純物伝導のふたつがあるため、それぞれの経路によりイオン化した割合を K_1 、 K_2 とする。

まず、バンド伝導に対する活性化エネルギー ΔE_1 を求める(図 4-15)。電界が存在しないときの活性化エネルギーを E_{im} 、電界による活性化エネルギーの変化分を ΔE_{PF} とする。このと

きのバンド伝導に対する活性化エネルギー ΔE_1 は次式で与えられる。

$$\Delta E_1 = E_{im} + \Delta E_{PF} \quad (4-66)$$

自由キャリアによる遮蔽、電界 F を考慮するとポテンシャルは次式で表される。

$$\Phi = -qFr - \frac{q^2}{4\pi\epsilon r} e^{-\frac{r}{\lambda}} \quad (4-67)$$

ここで、 q は電気素量、 ϵ は誘電率、 λ は遮蔽長、 F は電界である。

本計算では、遮蔽に寄与するキャリア密度は別途 N_s で与えることとする。このときの遮蔽長は次式で与えられる。

$$\lambda = \sqrt{\frac{\epsilon k_b T}{q^2 N_s}} \quad (4-68)$$

ここで、 k_b はボルツマン定数、 T は温度である。

既に述べたように遮蔽長が λ のときの活性化エネルギー E_{im} は次式により計算される。

$$E_{im} = E_{im0} \left(1 - \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2\right) e^{-\frac{2a}{\lambda}} \quad (4-69)$$

$$a = a_0 \left(1 + \frac{a}{\lambda}\right)^{-1} e^{\frac{a}{\lambda}} \quad (4-70)$$

ここで、 a_0 は次式で与えられるボーアモデルにおける有効ボーア半径である。また、 a は遮蔽長が λ のときの有効ボーア半径である。

$$a_0 = \frac{h^2 \epsilon}{\pi q^2 m} \quad (4-71)$$

E_{im0} [meV]については、GaN、AlN の活性化エネルギーをそれぞれ 210、630 meV とし、AlGaN については次式の線形補完を用いて求めた。

$$E_{im0} = 210x + 630(1 - x) \quad (4-72)$$

また、 ΔE_1 はプール・フレンケル効果により ΔE_{PF} だけ変化する。ポテンシャルの変化分は、式(4-67)のポテンシャルの極大値であるから、これの微分を 0 とする r を求めればよい。

$$\frac{d\Phi}{dr} = -qF - \frac{q^2}{4\pi\epsilon} \left(-\frac{e^{-\frac{r}{\lambda}}}{r^2} \cdot \left(1 + \frac{r}{\lambda}\right) \right) = 0 \quad (4-73)$$

上式を満たす r を r_p とすると、 ΔE_{PF} は次式で与えられる。

$$\Delta E_{PF} = \Phi(r_p) \quad (4-74)$$

以上の計算より、バンド伝導に対する活性化エネルギー ΔE_1 が得られる。

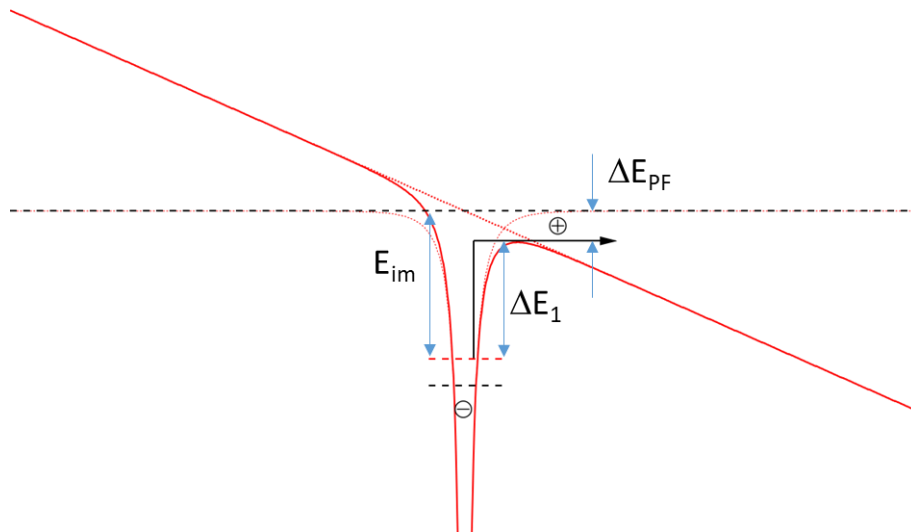


図 4-15 ΔE_1 の計算

続いて、 ΔE_2 の計算を行う(図 4-16)。 ΔE_2 は遮蔽、クーロンポテンシャルの重なり、プール・フレンケル効果の 3 種の影響を受ける。これらの影響を考慮したポテンシャルは次式で表される。

$$\Phi = -qFr - \frac{q^2}{4\pi\epsilon} \left(\frac{e^{-\frac{r}{\lambda}}}{r} + \frac{e^{-\frac{s-r}{\lambda}}}{s-r} \right) \quad (4-75)$$

ここで、s はイオン化アクセプタの最近接距離の期待値であり、次式で表される。

$$s = \Gamma \left(\frac{4}{3} \right) \left(\frac{4\pi}{3} KN \right)^{-\frac{1}{3}} \quad (4-76)$$

ここでK は合計のイオン化率であり、 K_1 、 K_2 の和である。

活性化エネルギーの変化分は、上式のポテンシャルの極大値で与えられるから、この微分を0 とする r を求めればよい。

$$\frac{d\Phi}{dr} = -qF - \frac{q^2}{4\pi\epsilon} \left(-\frac{e^{-\frac{r}{\lambda}}}{r^2} \cdot \left(1 + \frac{r}{\lambda} \right) + \frac{e^{-\frac{s-r}{\lambda}}}{(s-r)^2} \cdot \left(1 + \frac{s-r}{\lambda} \right) \right) = 0 \quad (4-77)$$

上式を満たす r を r_p とすると、クーロンポテンシャルの重なり、及び、プール・フレンケル効果による活性化エネルギーの変化分 ΔE は次式で与えられる。

$$\Delta E = \Phi(r_p) \quad (4-78)$$

以上の計算より、不純物伝導に対する活性化エネルギー ΔE_2 は、先に求めた E_{im} を用いて次式で与えられる。

$$\Delta E_2 = E_{im} + \Delta E \quad (4-79)$$

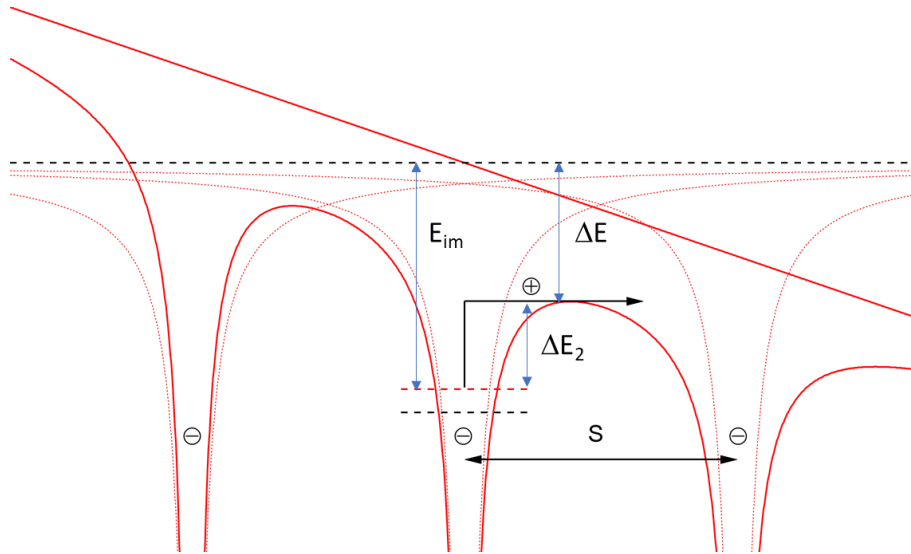


図 4-16 ΔE_2 の計算

これまでの計算により、 ΔE_1 、 ΔE_2 が求められた。これらの値を用いて、電荷中性条件からフェルミ準位を求める。図 4-11 に示されるように、価電子帯の上端を基準にとると、アクセプタ準位 E_a と中間準位 E_m のエネルギーは次式で表される。

$$E_a = \Delta E_1 \quad (4-80)$$

$$E_m = E_a - \Delta E_2 \quad (4-81)$$

既に述べたように、フェルミ準位、イオン化率はそれぞれ次の式より得られる。

$$E_f = k_b T \ln \left\{ \frac{N_v}{2N_A} - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\left(1 - \frac{N_v}{N_A}\right)^2 + 16 \frac{N_v}{N_A} \left(e^{\frac{E_a}{k_b T}} + e^{\frac{E_m}{k_b T}} \right)} \right\} \quad (4-82)$$

$$K = \frac{1 + 4e^{\frac{E_m - E_f}{k_b T}}}{1 + 4e^{\frac{E_m - E_f}{k_b T}} + 4e^{\frac{E_a - E_f}{k_b T}}} \quad (4-83)$$

上記の計算を自己無撞着な解が得られるまで反復することで、バンド伝導、不純物伝導における活性化エネルギー、及び、イオン化率を計算することが可能である。

4.4.3. イオン化率の電界強度依存性

上の計算手法を用いて、イオン化率の電界強度依存性を計算する。

スクリーニングに寄与するキャリア密度 N_s については、シミュレーション計算より得られたデバイス駆動時のコア/クラッド層界面近傍のキャリア密度を参考にする。コア/クラッド層界面には巨大な正の分極電荷に由来して、伝導帯に深いディップが形成している。このディップは電子の蓄積層となる。図 4-17 に 30 kA/cm^2 における電子分布のイオン化 Mg 濃度依存性のシミュレーション結果を示す。イオン化 Mg 濃度が 0 のとき、ディップの深さが最大になるため、このとき、コア/クラッド層界面近傍の電子密度は最大となる。図より、コア/クラッド層界面近傍の電子密度は最大で 10^{19} cm^{-3} 後半に及ぶことが分かる。

図 4-18 にスクリーニングに寄与するキャリア密度ごとのイオン化率の電界強度依存性の計算結果を示す。このとき、Al 組成は 0.63、アクセプタ濃度は $1.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ とした。また、図 4-19 に 50 % のイオン化率を得るのに必要な電界強度の N_s 依存性を示す。

スクリーニングに寄与するキャリア密度に依存して、イオン化率の電界強度依存性が変化していることが分かる。50 % のイオン化率を達成するために必要な電界強度はスクリーニングに寄与するキャリア密度が $1.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ のときに最大となっている。つまり、 N_s が $1.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ のときに最もイオン化しづらく、ここから N_s が増加しても減少してもイオン化率は増加するという結果になった。ここで得られた結果は次のように解釈される。

スクリーニングに寄与するキャリア密度が減少し、キャリアによる遮蔽が弱まると、遮蔽による基底状態のエネルギーの上昇は小さくなる。したがって、バンド伝導に対する活性化エネルギーは増加する。なお、遮蔽が弱まることで、クーロンポテンシャルの及ぶ範囲が広がるため、クーロンポテンシャルの重なりが増加し、不純物伝導に対する活性化エネルギーは減少する。

一方、スクリーニングに寄与するキャリア密度が増加し、遮蔽が強まると、遮蔽による基底状態のエネルギーの上昇は大きくなる。これにより、バンド伝導、不純物伝導に対する活性化エネルギーは減少する。なお、遮蔽が強まることで、クーロンポテンシャルの重なりは小さくなるため、不純物伝導に対する活性化エネルギーは遮蔽がない場合と比較して増加する。

これらの効果の競合によって、スクリーニングに寄与するキャリア密度が $1.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ から増減すると、イオン化しやすくなるという計算結果になった。

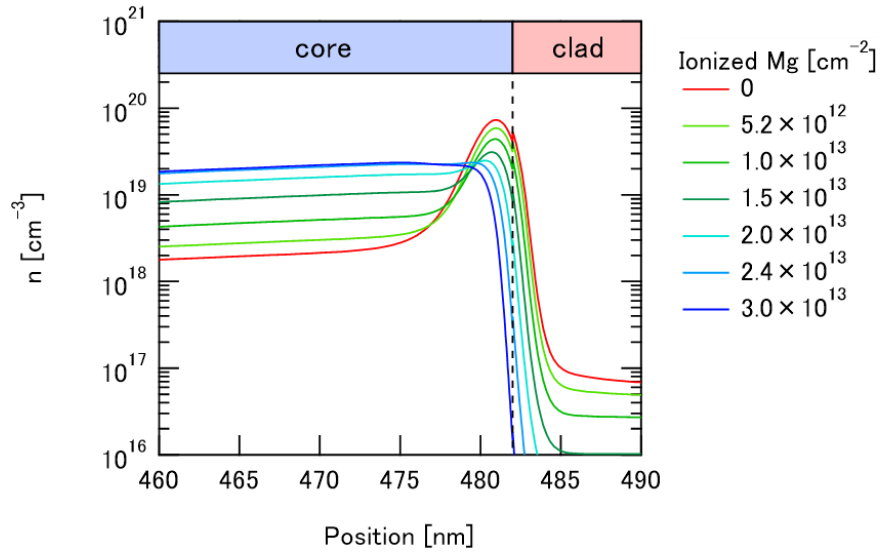


図 4-17 30 kA/cm²における電子密度分布のシミュレーション結果

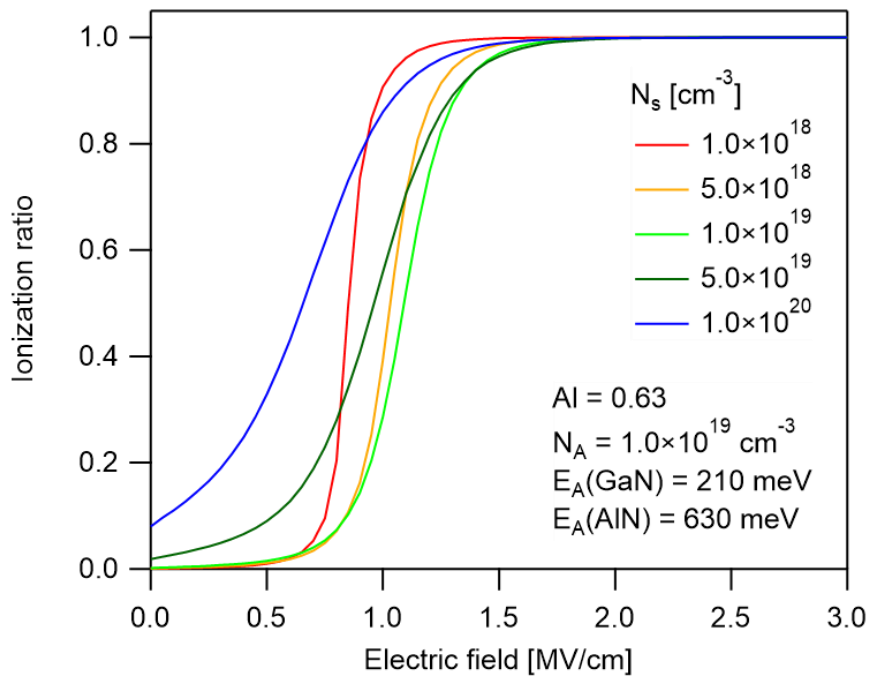


図 4-18 イオン化率の電界強度依存性の計算結果

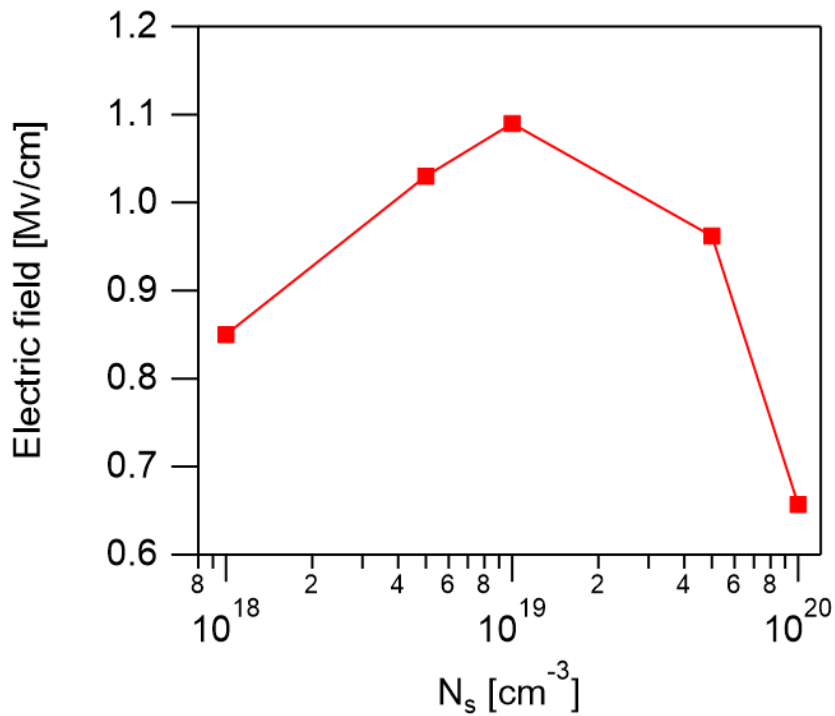


図 4-19 50%のイオン化率を得るのに必要な電界強度の N_s 依存性

図 4-20 にアクセプタ濃度ごとのイオン化率の電界強度依存性の計算結果を示す。このとき、Al 組成は 0.63、スクリーニングに寄与するキャリア密度は $1.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ とした。本計算では、電界強度が 2.0 MV/cm 程度に達すると、アクセプタのほとんどはイオン化するという結果が得られた。続いて、ここで得られたイオン化率のアクセプタ濃度・電界強度依存性を用いて、注入効率の向上に寄与し得るレベルのイオン化 Mg 濃度が得られるか検討する。

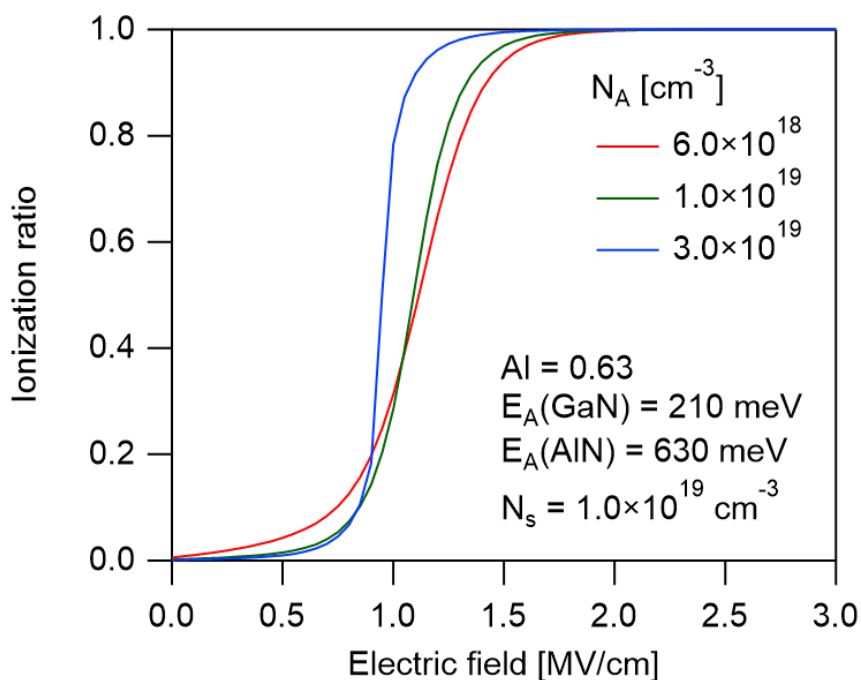


図 4-20 イオン化率の電界強度依存性の計算結果

4.5. 注入効率の計算

図 3-17 に示されるように、シミュレーション計算により、注入効率のコア/クラッド層界面近傍のイオン化 Mg 濃度依存性の結果が得られている。ここでは、シミュレーション構造として、コア/クラッド層界面近傍の 5 nm の範囲にのみ Mg がドーピングされた状況について考えている(表 3-4)。

また、シミュレーション計算により、イオン化アクセプタ濃度ごとに対応する電界強度分布も得られている。ここで得られた電界強度分布から、アクセプタ濃度・電界強度依存性を考慮した活性化エネルギーの計算モデルを用いて、イオン化アクセプタ濃度を算出することができる。

なお、電界強度分布はイオン化アクセプタが配置されることで変化する。まず、イオン化アクセプタが配置されたときに、電界強度分布がどのように変化するか検討を行う。ここでは、定性的な変化を見ることを目的としているため、単純なモデルを用いて計算する。

電界強度分布の検討に用いるモデルを図 4-21 に示す。コア/クラッド層界面を原点にとり、領域(i)にのみ負の電荷密度 n が一様に存在しているとして、領域(i)におけるポアソン方程式を解く。解くべきポアソン方程式とその積分を次に示す。

$$\frac{d\phi^2}{dx^2} = \frac{n}{\varepsilon} \quad (4-84)$$

$$\frac{d\phi}{dx} = \frac{n}{\varepsilon}x + C_1 \quad (4-85)$$

$$\phi = \frac{n}{2\varepsilon}x^2 + C_1x + C_0 \quad (4-86)$$

ここで、境界条件として次のものを考える。まず、原点(コア/クラッド層界面)には正の分極電荷が蓄積しているため、原点における電界は、

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x=0} = \frac{\sigma}{2\varepsilon} \quad (4-87)$$

で与えられるとする。ここで、 σ は分極電荷の面密度、 ε は誘電率である。また、原点から d だけ離れた位置を基準にとり、この位置における電界強度を 0 とする。

$$\phi(d) = 0 \quad (4-88)$$

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x=d} = 0 \quad (4-89)$$

ここで、 d は領域(i)に一樣な電荷密度 n が存在するときの分極電荷による電界が及ぶ範囲に対応している。上の境界条件を用いて、 d について解くと次式が得られる。

$$d = \frac{\sigma}{2n} \quad (4-90)$$

したがって、イオン化アクセプタを配置することにより、電界強度の及ぶ範囲が狭まること分かる。電界強度分布はイオン化アクセプタ濃度に依存するため、電界強度分布から計算されるイオン化アクセプタ濃度を仮定すると、計算に用いたもとの電界強度分布が変化することになる。図 4-22 に 30 kA/cm²におけるコア/クラッド層界面近傍の電界強度分布のシミュレーション結果を示す。図中の赤く塗られた領域にのみ Mg ドーピングが行われている。図より、イオン化アクセプタ濃度の増加に伴い、強電界のかかる領域が狭まっていることが分かる。したがって、プール・フレンケル効果により、活性化エネルギーが減少する領

域はイオン化アクセプタ濃度の増加に伴い減少するため、電界強度分布の変化を考慮したイオン化アクセプタ濃度の計算を行う必要がある。

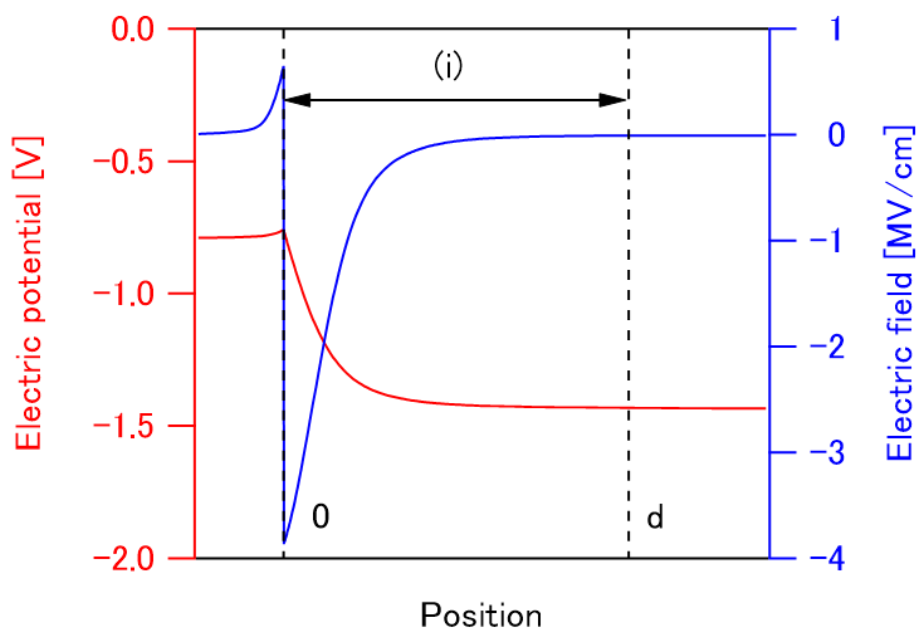


図 4-21 コア/クラッド層界面近傍の電位と電界強度分布

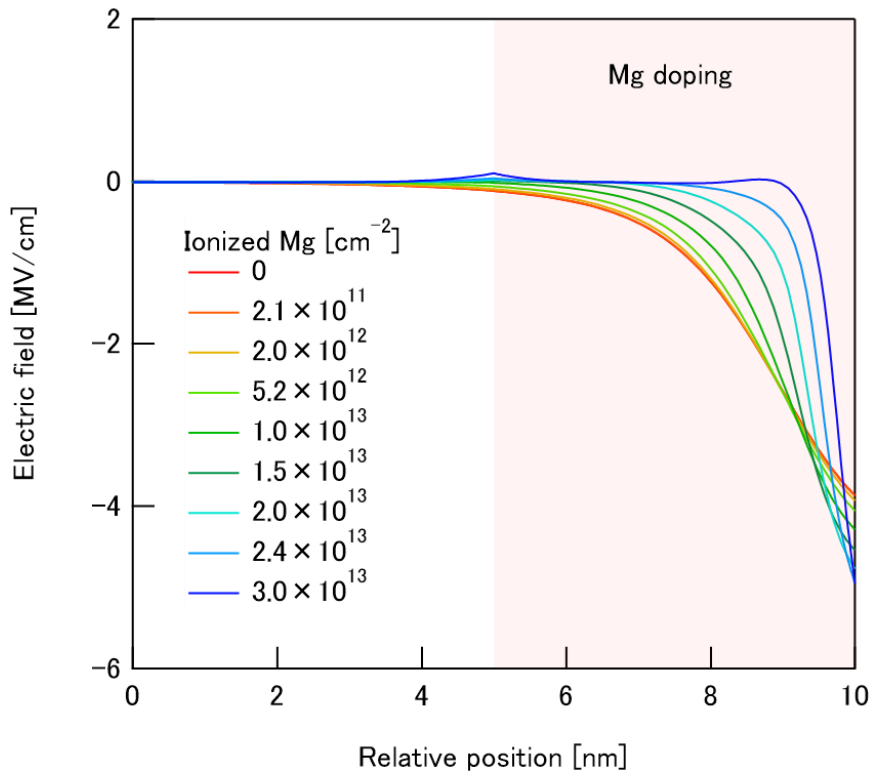


図 4-22 30 kA/cm²におけるコア/クラッド層界面近傍の電界強度分布のシミュレーション結果

上記のことを踏まえて、下記の方法で注入効率の計算を行うこととする。

シミュレーション計算により、電界強度分布ごとに注入効率とコア層のイオン化 Mg 濃度の計算値が得られている。

そこで、電界強度分布ごとに、アクセプタ濃度、電界強度依存性を考慮した計算モデルを用いて、イオン化 Mg 濃度を計算する。ここで得られたイオン化 Mg 濃度がシミュレーション計算より得られているイオン化 Mg 濃度と一致したとき、このイオン化 Mg 濃度に対応する注入効率を解とする。

図 4-23 に Al 組成が 0.63、アクセプタ濃度が $6.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ のときの計算の一例を示す。図中の $N_A(\text{sim})$ はシミュレーション計算より得られた注入効率とイオン化アクセプタ濃度の関係を示しており、マーカーごとに対応する電界強度分布が得られている。その電界強度分布から算出したイオン化アクセプタ濃度を $N_A(\text{PF})$ として示している。したがって、ふたつの曲線の交点において、シミュレーション計算から得られるイオン化アクセプタ濃度と、プール・フレンケルモデルから算出されるイオン化アクセプタ濃度が一致する自己無撞着な解が得られる。

シミュレーションにおいてはイオン化アクセプタ濃度の増加に伴い注入効率が増加する

ため、 $N_A^-(\text{sim})$ は右肩上がりの曲線となる。一方、 $N_A^-(\text{PF})$ はイオン化アクセプタ濃度の増加に伴い、電界強度分布が縮小するため、高注入効率に対応する電界強度分布から計算されるイオン化アクセプタ濃度は小さくなり、右肩下がりの曲線となる。

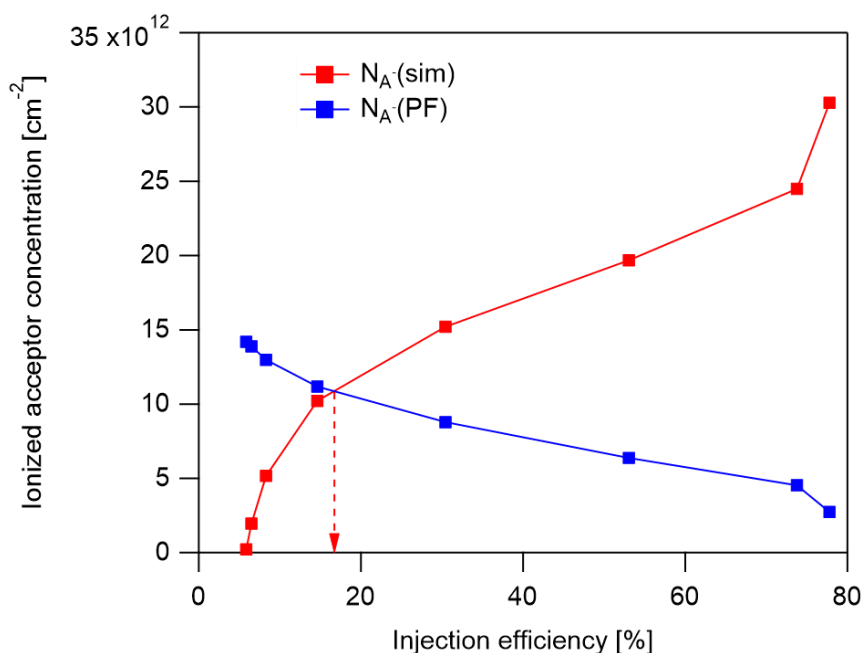


図 4-23 注入効率の算出

上述の計算をアクセプタ濃度ごとに行うことによって、注入効率をコア/クラッド層界面近傍のアクセプタ濃度の関数として算出することができる。表 3-4 の構造を用いて算出した注入効率のアクセプタ濃度依存性の計算結果を図 4-24 に示す。本計算では、Al 組成を 0.63、遮蔽に寄与するキャリア密度 N_s を $1.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ とした。

注入効率は Mg 濃度が $1.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ を超えたあたりから大きく増加していくという結果が得られた。 $1.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ の Mg 濃度は AlGaIn 系発光デバイスにおいて一般的に使用される範囲の Mg 濃度である。したがって、活性化エネルギーのアクセプタ濃度・電界強度依存を考慮した計算モデルを用いることで、実験的に可能な Mg 濃度の範囲で注入効率の向上に寄与し得るレベルのイオン化アクセプタ濃度が達成し得ることが示された。

また、計算と同様の条件で作製した試料 (3.4 参照) の注入効率の実験値を図 4-24 に追記したものを図 4-25 に示す。注入効率は、10%の光取り出し効率、50%の内部量子効率を仮定し、100 mA (0.13 kA/cm^2)における注入効率を算出した。図に示すように、実験・計算の双方において、 $1.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ の Mg 濃度から注入効率が向上することが確認された。

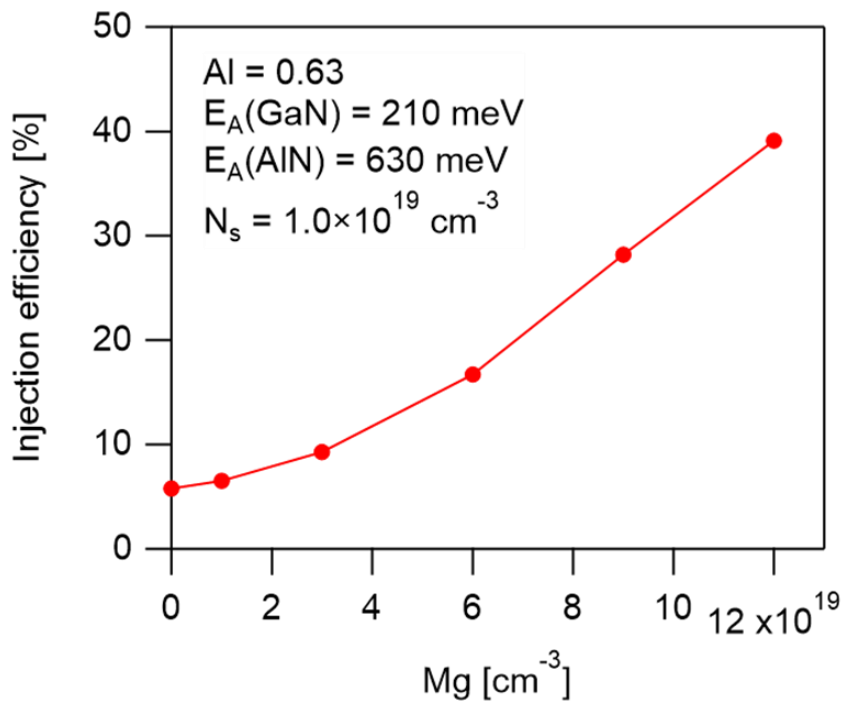


図 4-24 注入効率の Mg 濃度依存性の計算値

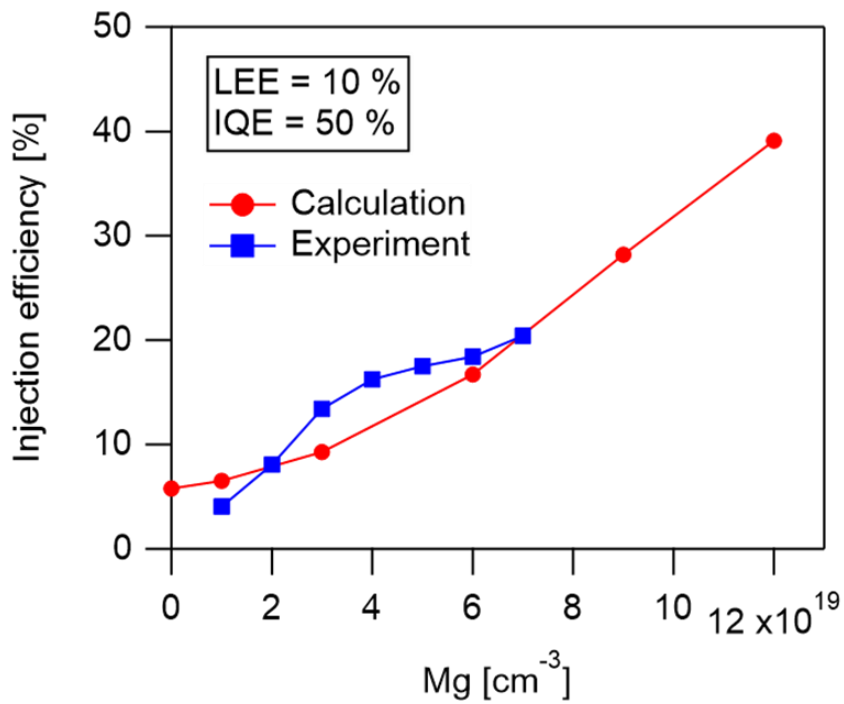


図 4-25 注入効率の実験値と計算値の比較

第5章 深紫外 LD デバイスの作製

5.1. 緒言

第3章では、LEDと同様の加工、測定条件でEL測定を実施し、外部量子効率の測定を行った。これにより、コア層へのEBL、Mgドーピングが注入効率に及ぼす影響について調査した。本章では、実際に共振器を形成し、EL特性、レーザ発振の有無を確認した。

5.2. デバイス作製

5.2.1. プロセス一覧

ここでは、本実験において試料作製に用いたプロセスを一覧する。

5.2.1.1. 超音波洗浄

超音波洗浄には、キャビテーションが主要な役割を担っている。キャビテーションとは、液体の流れの中で圧力差によって、短時間に泡の発生と消滅が起きる現象である。液体に超音波を照射すると、液体が激しく揺さぶられ、局所的に圧力が高い箇所と、低い箇所が生じる。圧力が飽和蒸気圧以下の低圧状態になった箇所において、キャビテーションと呼ばれる気泡が発生する。再び圧力が高くなり、キャビテーションが押しつぶされるとき、液体中に衝撃波を発生させる。超音波洗浄では、この衝撃波により、固体表面に付着した汚れを剥離、洗浄する。LD試料表面のクリーニングにおいては有機溶剤であるアセトンを用いて、超音波洗浄を行った。この際、アセトン、及び、試料が入ったビーカーを洗浄槽の水に沈めることで、間接的に超音波洗浄を行った。

5.2.1.2. スピンコート法

スピンコート法とは、基板表面に液体を塗布した後、基板を一定時間高速に回転することで基板上に薄膜を作製する方法である。「スピンコータ」と呼ばれる回転遠心力を利用した塗布装置が用いられる。基板の回転により液体は径方向に広がり、均一な厚さの被膜が形成される。LDプロセスでは、フォトリソグラフィ工程においてレジスト(AZ1500, AZ5214)を成膜する際に用いた。下地がSiO₂の場合には、フォトレジストを塗布する前に下地との密着性を向上させるための表面改質、すなわち、界面活性剤塗布による疎水化処理が必要であ

る。そのため、下地が SiO_2 の場合には、疎水化処理のため、HMDS(hexamethyl-disilazane)と呼ばれる有機膜をコートした。この HMDS を成膜する際にもスピコートを用いた。

5.2.1.3. ベーキング

ベーキングは熱処理工程であり、プリベーク、ポストベークがある。プリベークは、塗布されたレジスト膜から溶剤を除去することを目的に行われる熱処理である。本実験では、 $80\text{ }^\circ\text{C}$ 、10 分間の加熱処理を行った。ポストベークは、フォトリソグラフィ工程終了後に行なわれるエッチングに対する耐性を上げること、ウェハ表面との接着性を高めることを目的として行なわれる熱処理である。本実験では、レジスト AZ1500 に対しては、 $95\text{ }^\circ\text{C}$ 、10 分間の加熱処理を行った。

5.2.1.4. 露光

露光とは、フォトマスクのパターンを基板上のフォトレジストに転写する工程である。本実験では、マスクアライナを用いて密着露光を行った。密着露光とは、マスクと基板を密着させて露光する方式である。まず、基板と数 μm のギャップをおいてマスクを対向させ、マスク上と基板上の位置合わせ用十字マークが重なるように位置を調整する。重なっていることを確認した後、両者を密着させ、マスクの上から水銀ランプを用いて紫外線を照射し露光した。

5.2.1.5. 現像

現像とは、レジスト膜を現像液に接触させ、パターン部以外のフォトレジストを除去する作業である。本実験では、現像液には TMAH(水酸化テトラメチルアンモニウム)を用いた。また、現像時間は 45 秒とした。

5.2.1.6. エッチング

エッチングとは、薬液やイオンなどの腐食作用を利用して、試料表面の一部を除去し、材料表面を加工する方法である。本実験では、 SiO_2 のエッチングには、 NH_4F と HF との混合物であるバッファードフッ酸(BHF)を、AlGaN 層のエッチングには、誘導結合プラズマ(ICP)

エッチングを使用した。また、ミラー面の形成については、ミラー端面の平坦性向上のため、ICP エッチングの後、水酸化テトラエチルアンモニウム(TMAH)によるウェットエッチングの二段階処理を行った。

5.2.2. 導波用リッジ形成

導波用リッジ形成は以下の手順で行った。一部工程に対応する試料状態の模式図を図 5-1 に示す。

1. 超音波洗浄(アセトン)で試料のクリーニングを実施(5 min)
2. スピンコータを用いて、レジスト(AZ5214)を塗布
3. クリーンオーブンでレジストのプリベークを実施(80 °C、10 min)
4. マスクアライナによる露光
5. クリーンオーブンでレジストのベーキングを実施(95 °C、10 min)
6. 露光装置で紫外線を照射(80 s)
7. TMAH による現像(45 s)
8. 超高真空蒸着装置でマスク用 Ni を蒸着(2 μm)
9. 超音波洗浄(アセトン)でレジストを除去
10. ICP エッチングで n-AlGaIn を露出
11. マスク用 Ni を王水で除去

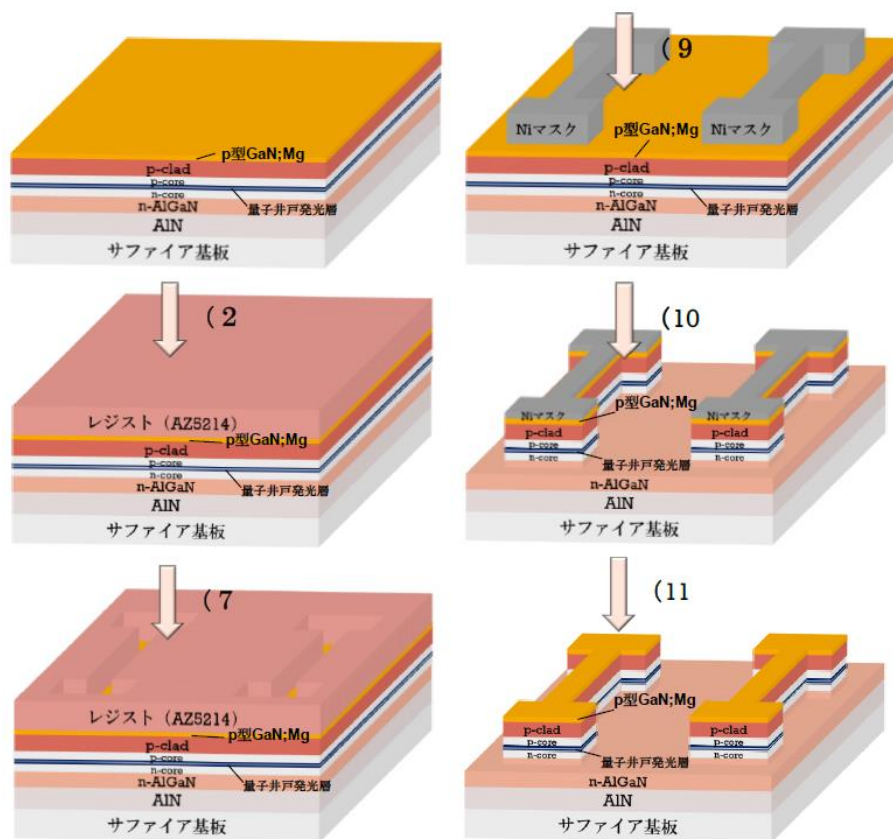


図 5-1 導波用リッジ形成の手順

導波用リッジ形成後にレーザ顕微鏡を用いて測定した表面形状像を図 5-2 に示す。図 5-2 より得られたリッジ高さはおよそ 1200 nm であり、設計通りに導波用リッジが形成されていることが確認された。

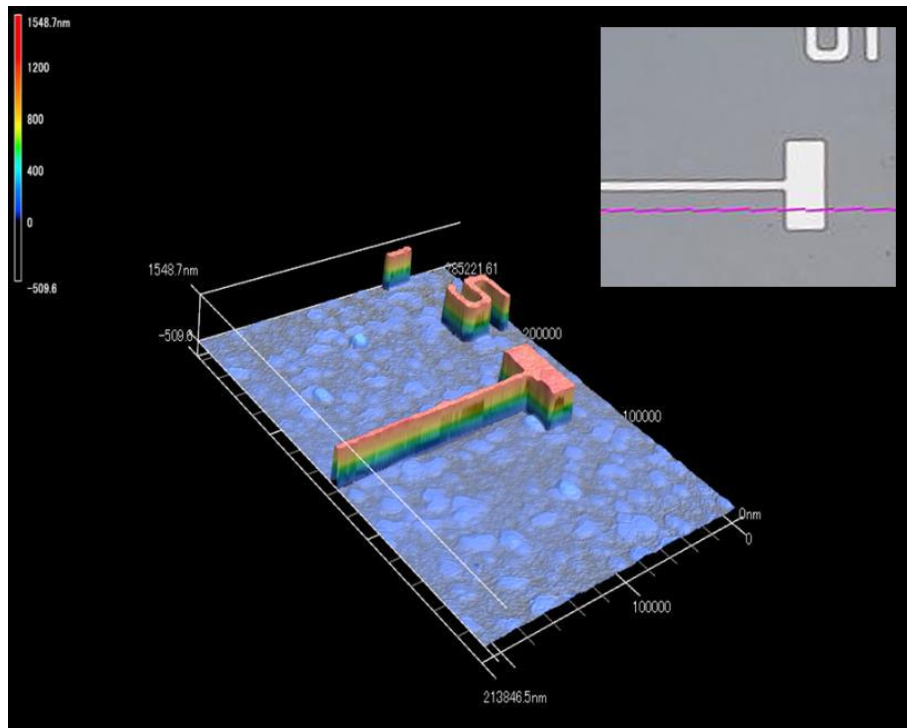


図 5-2 導波用リッジ形成後のレーザ顕微鏡像

5.2.3. n 電極、p 電極形成

n 電極、p 電極の形成は以下の手順で行った。一部工程に対応する試料状態の模式図を図 5-3 に示す。

1. 試料を BHF 入りのビーカーに浸し、酸化膜を除去(30 min)
2. スピンコータを用いてレジスト(AZ5214)を塗布
3. クリーンオープンでレジストのプリバークを実施(80 °C、10 min)
4. マスクアライナによる露光
5. クリーンオープンでレジストのベーキングを実施(95 °C、10 min)
6. 露光装置で紫外線を照射(80 s)
7. TMAH による現像(45 s)
8. 超高真空蒸着装置で n 電極(V/Al/Ni/Au)を蒸着
9. 超音波洗浄を実施
10. p 電極用に 2-7 の工程を再度実施
11. 超高真空蒸着装置で p 電極(Ni/Au)を蒸着
12. 超音波洗浄を実施

13. 高真空アニールを用いて、電極アニールを実施((550 °C、10 min、Ar 雰囲気下)

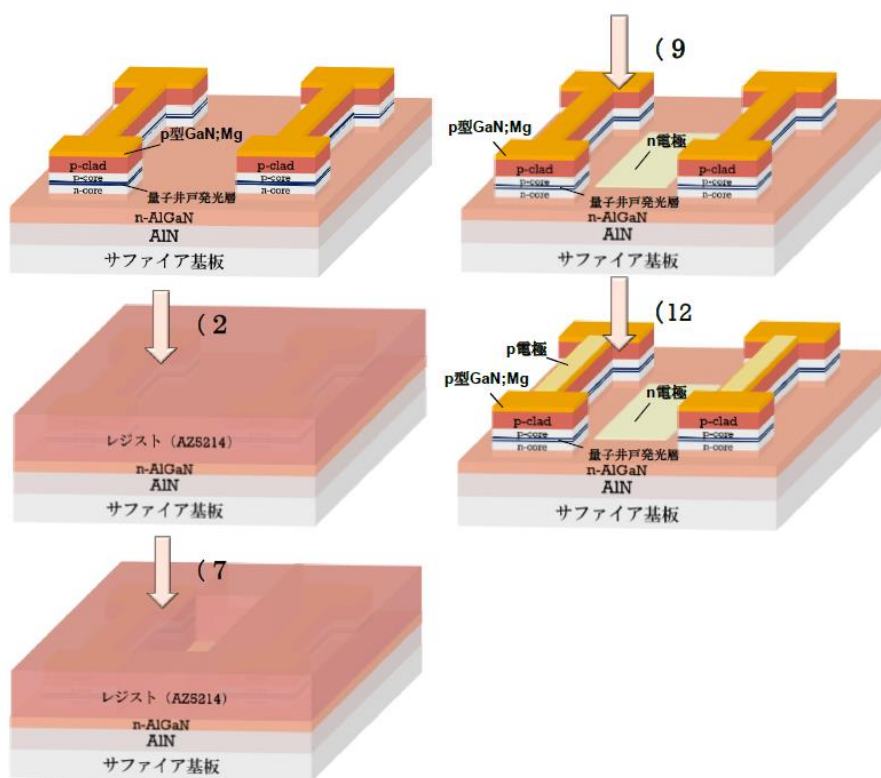


図 5-3 n 電極、p 電極形成の手順

n、p 電極形成後の試料の模式図、レーザ顕微鏡像を図 5-4、図 5-5 に示す。n 電極には基板側から順に、220 Å の V、620 Å の Al、110 Å の Ni、150 Å の Au を蒸着した。p 電極には基板側から順に、60 Å の Ni、800 Å の Au を蒸着させた。

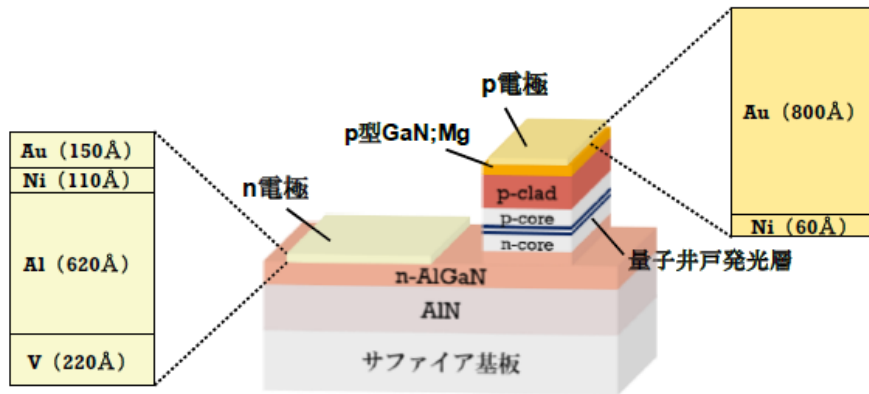


図 5-4 n 電極、p 電極形成後の試料の模式図

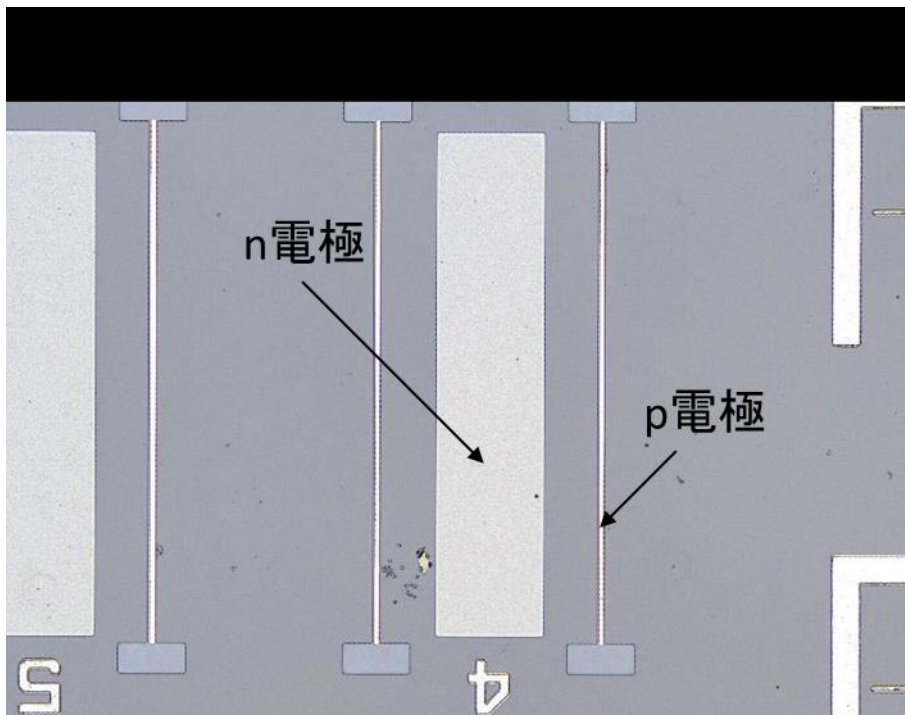


図 5-5 電極形成後のレーザ顕微鏡像

5.2.4. ミラー形成

ミラー形成は以下の手順で行った。一部工程に対応する試料状態の模式図を図 5-6 に示す。

1. プラズマ CVD 装置で SiO_2 膜を堆積(500 nm)

2. スピンコータを用いて、HMDS を塗布
3. クリーンオープンでベーキングを実施(100 °C、10 min)
4. スピンコータを用いて、レジスト(AZ1500)を塗布
5. クリーンオープンでレジストのプリバークを実施(80 °C、10 min)
6. マスクアライナによる露光
7. TMAH による現像(45 s)
8. クリーンオープンでレジストのポストバークを実施(95 °C、10 min)
9. 試料を BHF 入りのビーカーに浸し、レジストが堆積していない SiO₂ 膜を除去(90 s)
10. ICP エッチングでミラー面を形成
11. TMAH によるウェットエッチングによりミラー面の平坦性を強化(90 - 95 °C、7.5 min)
12. 超音波洗浄(アセトン)でクリーニングを実施

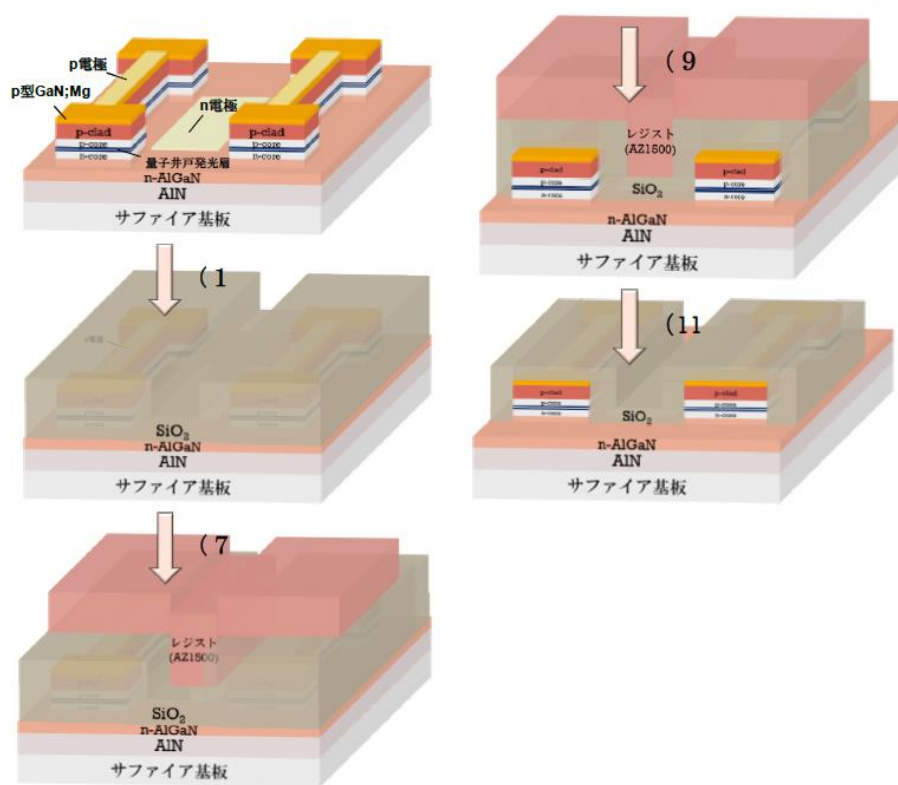


図 5-6 ミラー形成の手順

ミラー形成後、ミラー端面の SEM 観察を行った。得られた SEM 像を図 5-7 に示す。十分な平坦性を確保するために、ICP エッチング、TMAH によるウェットエッチングの二段階処理を行ったが、ミラー端面には多少の凹凸が確認された。これはミラー損失の増加の要因

になり得る。

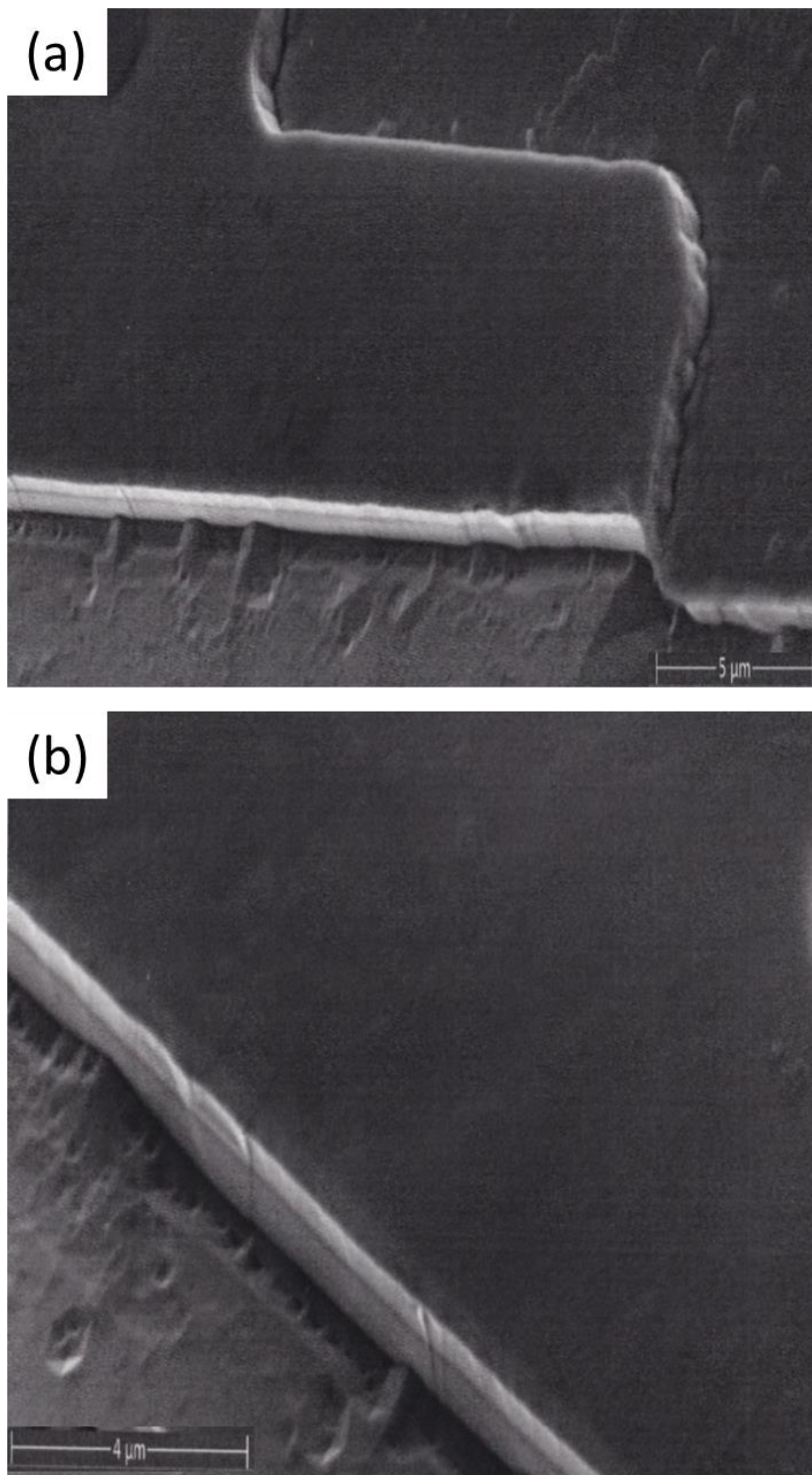


図 5-7 ミラー端面の SEM 像

5.2.5. SiO₂窓開け(n電極、p電極の露出)

SiO₂窓開けは以下の手順で行った。一部工程に対応する試料状態の模式図を図 5-8 に示す。

1. スピンコータを用いて、HMDS を塗布
2. クリーンオーブンでベーキングを実施(100 °C、10 min)
3. スピンコータを用いて、レジスト(AZ1500)を塗布
4. クリーンオーブンでレジストのプリベークを実施(80 °C、10 min)
5. マスクアライナによる露光
6. TMAH による現像(60 s)
7. クリーンオーブンでレジストのポストベークを実施(95 °C、10 min)
8. 試料を BHF 入りのビーカーに浸し、レジストが堆積していない SiO₂膜を除去(90 s)
9. 超音波洗浄(アセトン)でレジストを除去(15 min)
10. 1-9 を再度実施し、p 電極を露出

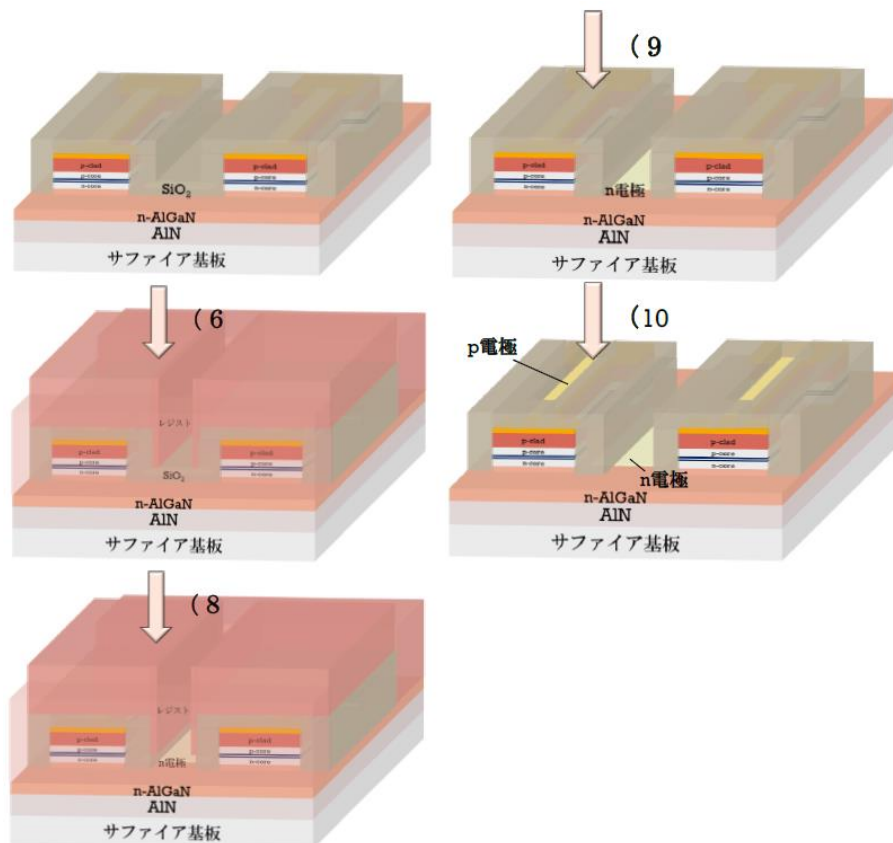


図 5-8 SiO₂ 窓開けの手順

5.2.6. 金パッド蒸着(p 電極)

p 電極への金パッド蒸着は以下の手順で行った。一部工程に対応する試料状態の模式図を図 5-9 に示す。

1. スピンコータを用いてレジスト(AZ5214)を塗布
2. クリーンオープンでレジストのプリバークを実施(80 °C、10 min)
3. マスクアライナによる露光
4. クリーンオープンでレジストのベーキングを実施(95 °C、10 min)
5. 露光装置で紫外線を照射(80 s)
6. TMAH による現像(45 s)
7. 超高真空蒸着装置で金パッド(Ti/Au)を蒸着
8. 超音波洗浄を実施

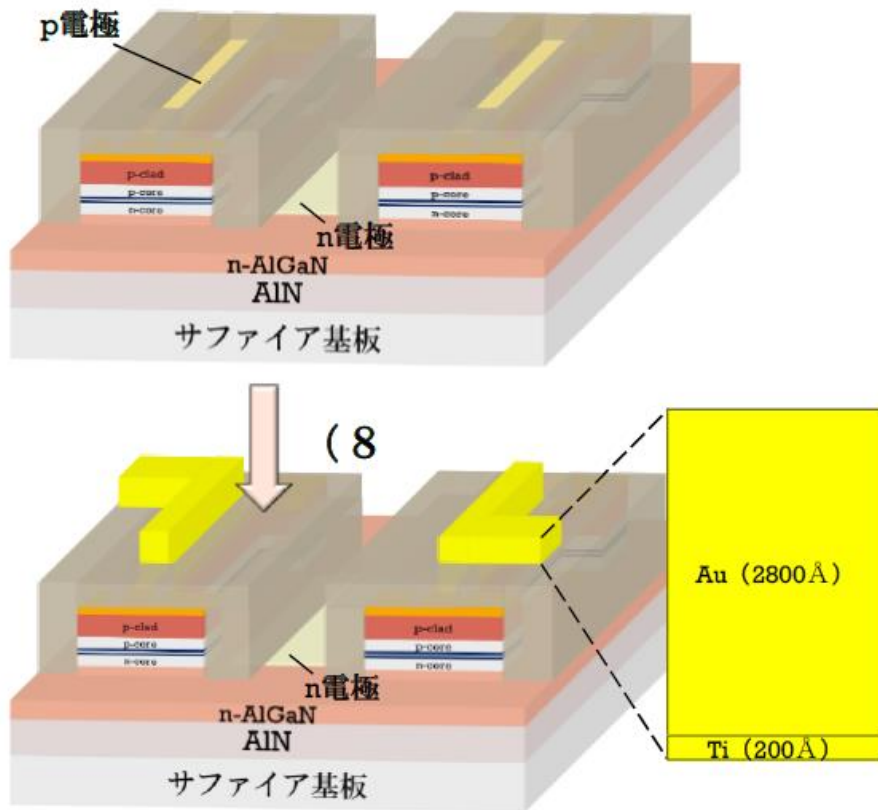


図 5-9 金パッド蒸着の手順

以上の工程を経て、完成した試料の模式図、顕微鏡像を図 5-10、図 5-11 に示す。本実験では、試料表面に種々の共振器(計 40 種類)を形成した。図 5-11 に示したのは、共振器長 400 μm 、共振器幅 10 μm の共振器である。

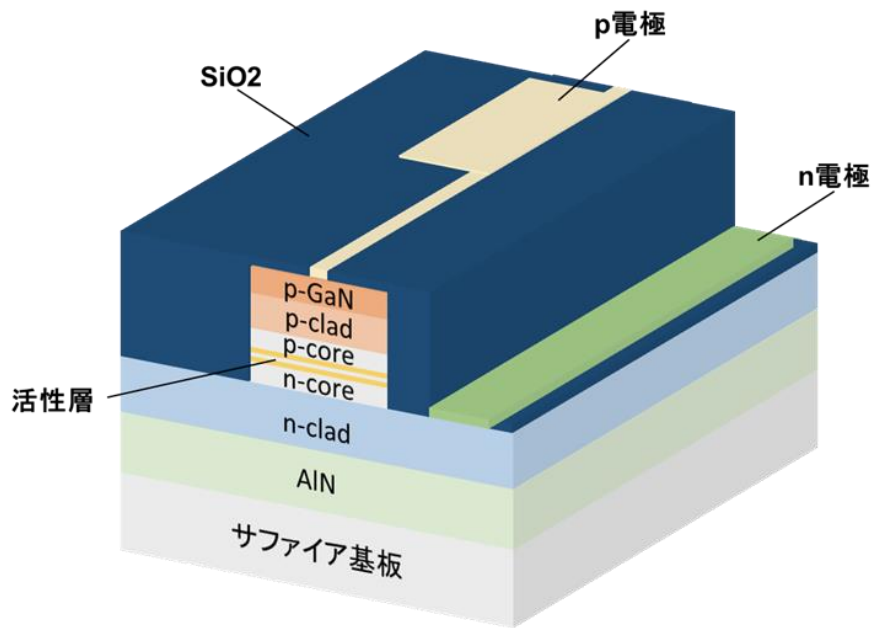


図 5-10 作製試料の模式図

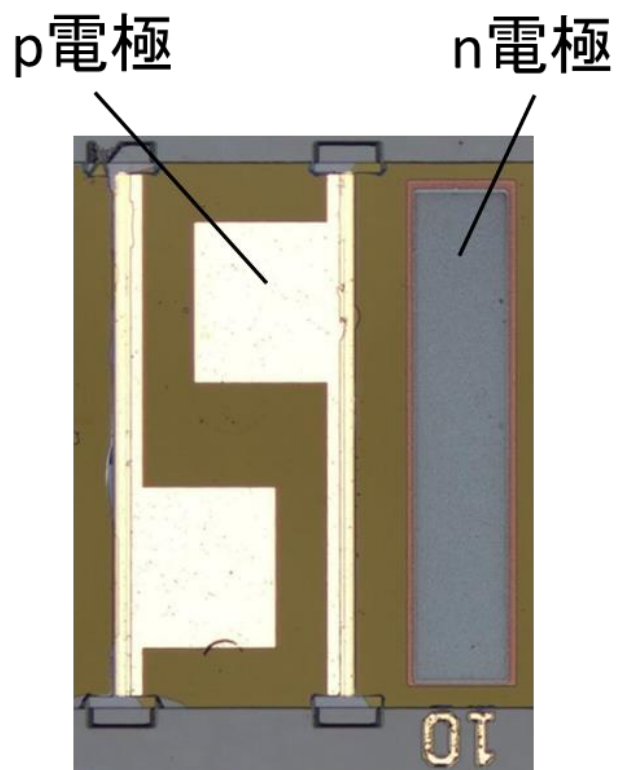


図 5-11 作製試料の顕微鏡像

5.3. EL 測定による作製試料の評価

5.3.1. 実験方法

前節の LD プロセスを経て完成した試料に対し、室温・パルス駆動で電流注入を行い、EL スペクトルの測定を実施した。発熱の影響を避けるため、パルス幅は 50 ns、デューティ比は 0.005 %とした。なお、試料表面には、多数のヒロックが見られたため、共振器については、ヒロックと共振器との重なりがないものを選択して測定を行った。

測定した 2 試料の構造を表 5-1、表 5-2 に示す。試料 1 には p 側コア層への EBL、及び、Mg ドーピングの導入を行っていない。一方、試料 2 では、コア層に EBL を導入し、EBL と p 側クラッド層に囲まれた領域に対し、Mg ドーピングを行った。試料 1 については、共振器幅 10 μm 、共振器長 700 μm の共振器を、試料 2 については、共振器幅 10 μm 、共振器長 400 μm の共振器を用いて EL 測定を行った。

表 5-1 試料 1 の試料構造

Layer	Thickness [nm]	Al content
n-clad	1500	0.70
n-core	50	0.63
2×well	3.4	0.36
2×barrier	6	0.63
p-core	50	0.63
PD1	360	1.0 -> 0.7
PD2	70	0.7 -> 0
p-GaN	200	0

表 5-2 試料 2 の試料構造

Layer	Thickness [nm]	Al content
n-clad	1500	0.70

n-core	50	0.63
4×well	1.7	0.36
4×barrier	6	0.63
p-core1	2	0.63
EBL	5	0.75
p-core2	43	0.63
PD1	360	1.0 -> 0.7
PD2	70	0.7 -> 0
p-GaN	200	0

5.3.2. 結果と考察

図 5-12 に試料 1 の EL スペクトルを示す。また、図 5-12 からピーク強度の電流密度依存性を抜き出した結果を図 5-13 に示す。ピーク強度は電流密度に比例して増加し、最大で 130 kA/cm² までの大電流注入に成功した。なお、レーザ発振は確認されなかった。

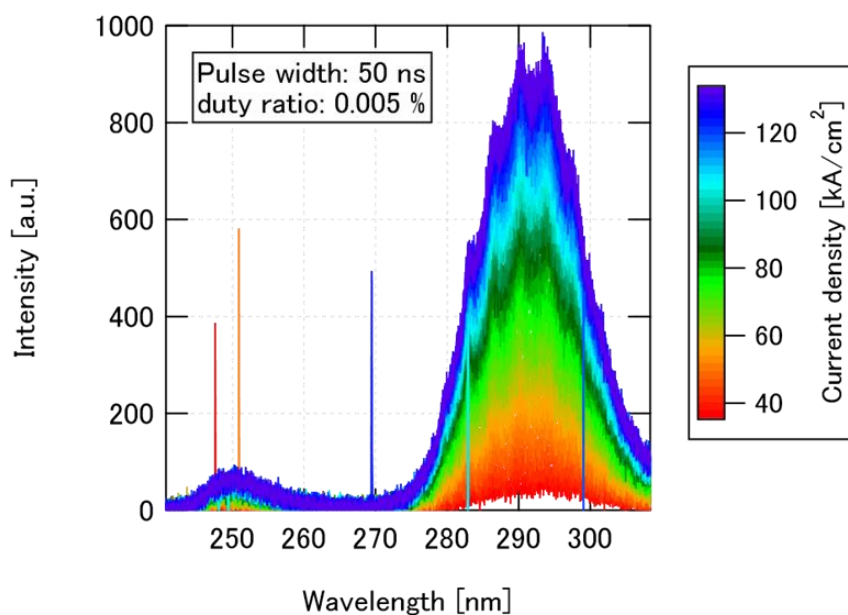


図 5-12 試料 1 の EL スペクトルの電流密度依存性

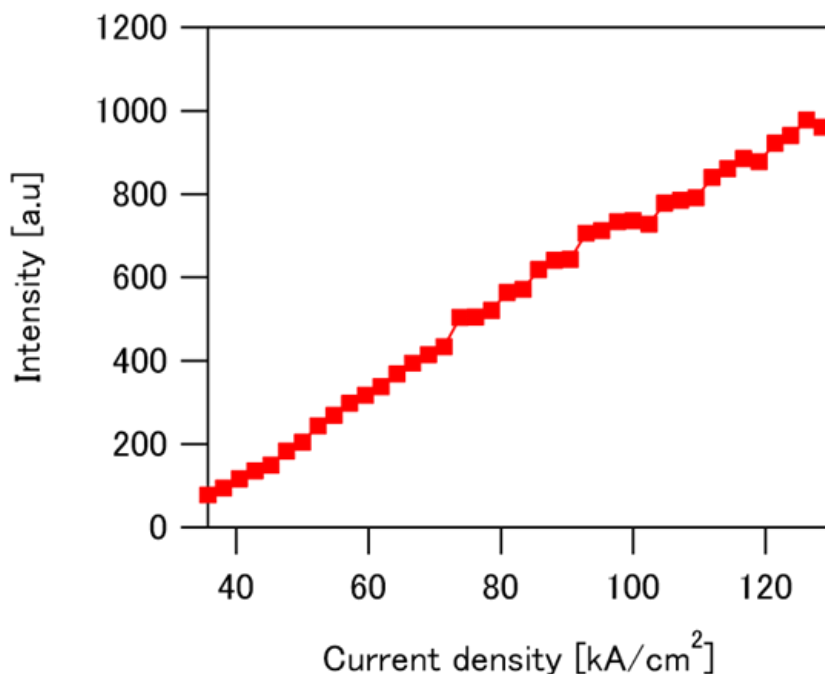


図 5-13 試料 1 のピーク強度の電流密度依存性

図 5-14 に試料 2 の EL スペクトルを示す。また、図 5-14 からピーク強度の電流密度依存性を抜き出した結果を図 5-15 に示す。電流密度が 140 kA/cm^2 程度に達すると、ピーク強度は飽和傾向を示したが、最大で 160 kA/cm^2 までの大電流注入に成功した。なお、 160 kA/cm^2 までの電流注入ではレーザ発振は確認されなかった。

p 側コア層への EBL、及び、Mg ドーピングの導入を行った試料 2 では、これを行わなかった試料 1 と比較して、高い光出力が確認された。図 5-16 に試料 1、試料 2 の EL スペクトルのピーク強度の電流値依存性の比較を示す。エピタキシャル構造が異なっているため、厳密な比較にはならないが、4 A の電流値において 20 倍以上の高い光出力が観測された。これより、LED プロセスで確認されたように、コア層へ Mg をドーピングすることで、LD プロセス後の高電流注入条件においても顕著な注入効率の改善が確認された。

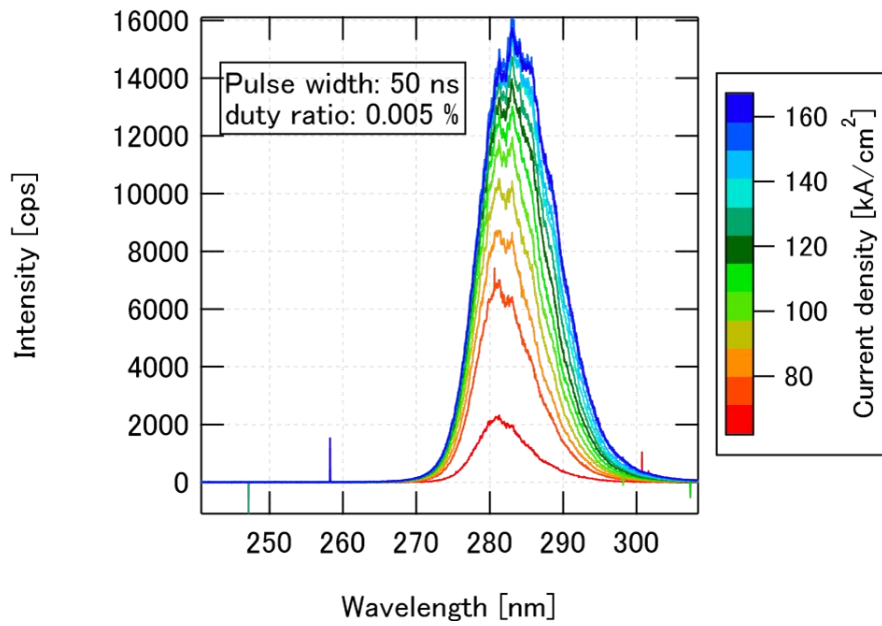


図 5-14 試料 2 の EL スペクトルの電流密度依存性

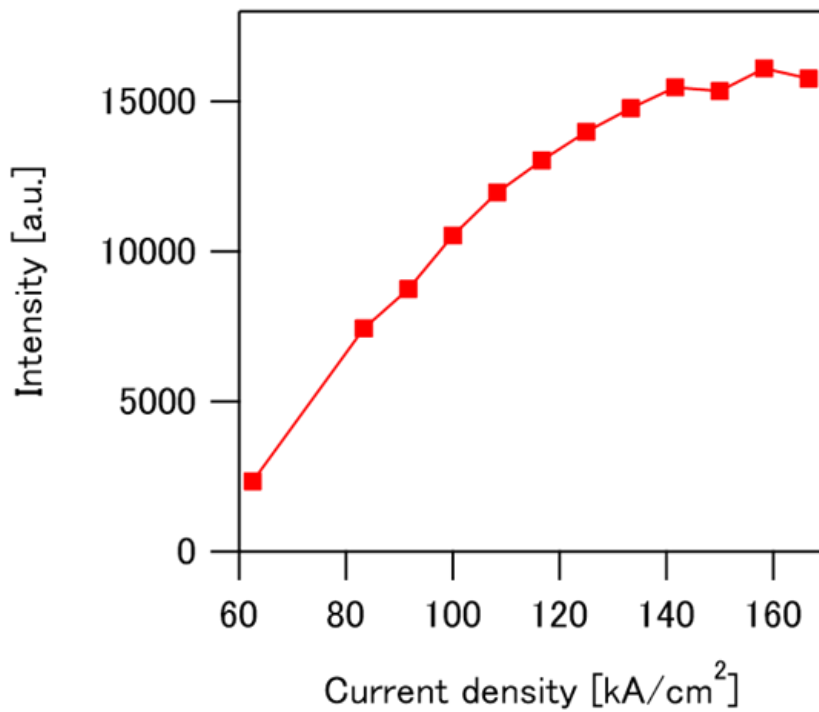


図 5-15 試料 2 のピーク強度の電流密度依存性

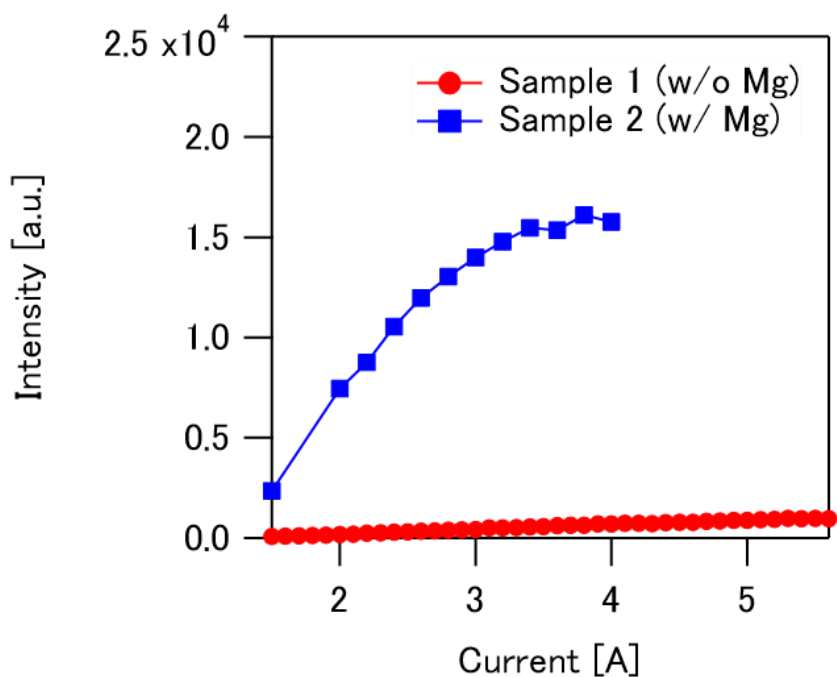


図 5-16 試料 1、試料 2 のピーク強度の電流値依存性の比較

なお、本実験では、レーザ発振を確認することはできなかった。今回、レーザ発振が確認されなかった主な原因としては、次の三点が考えられる。第一に、AlGaIn 層の結晶性(転位密度)が不十分であったこと。第二に、エピタキシャル層構造の最適化が不十分であったこと。第三に、ミラー端面の表面平坦性が低く、ミラー損失が増加したこと。本実験では、時系列の関係から、シミュレーション計算、及び、LED プロセスでの検討結果から予想される最適構造を用いていない。高い注入効率が期待される試料 2 においては、計算上、適当ではない 4 周期の井戸構造を採用し、かつ、p 側コア層のほぼ全域に Mg ドーピングを行っている。これにより、ネットモード利得が大幅に損なわれた可能性がある。特に、キャリア注入の不均一により、n 側の井戸層への十分なキャリア注入が行われなかった場合、これらは吸収層として働くため、閾値電流密度は著しく増加する。また、共振器形成において重要なミラーの平坦性、及び、垂直性が不十分であった可能性が考えられる。

第6章 総括

本研究では、深紫外 LD の低閾値化を目的に、深紫外 LD の構造検討を行った。特に、深紫外 LD において重要な課題である注入効率の改善に着目して構造最適化を実施した。

p 側コア層に、電子ブロック層と Mg ドーピングを導入することによって、注入効率が顕著に向上することを実験的に示した。また、p 側コア層への Mg ドーピングレベルを最適化することにより、従来の注入効率の報告値を大きく上回る 20%以上の注入効率を達成した。これは、深紫外レーザダイオードの低閾値化、さらなる短波長化の実現に際し、非常に重要な知見と言える。

また、シミュレーション計算を用いて、コア層への Mg ドーピングによる注入効率の改善機構について検討を行った。シミュレーション計算より、注入効率の改善は、伝導帯のコア/クラッド層界面に生じるディップの観点から説明されることを示した。組成差の大きいコア/クラッド層界面には巨大な正の分極電荷が生じ、これにより伝導帯に深いディップが形成される。ディップの形成により電子ブロック層を兼ねる p 側クラッド層の電子に対する障壁高さが減少することで注入効率が低下する。コア/クラッド層界面近傍に反対符号を有するイオン化 Mg を配置することでディップが抑制され、注入効率が改善することが期待される。シミュレーション計算より、コア/クラッド層界面近傍にイオン化 Mg を配置することにより、注入効率が顕著に改善し得ることを示した。

なお、Mg の活性化エネルギーは高く、通常の条件においては、注入効率の改善に寄与し得るイオン化 Mg 濃度を得ることは困難である。しかし、プール・フレンケル効果を考慮することで、注入効率の向上に寄与し得るイオン化 Mg 濃度を達成し得ることを示した。

以下に各章において得られた知見をまとめる。

第1章 序論

第1章では、本研究で用いた III 族窒化物の特徴について述べた。また、UVC、UVB 領域においてレーザ発振が報告されている LD 構造を参考に、レーザ発振・低閾値化における課題とアプローチを概観した。

第2章 シミュレーション計算と導波路解析の併用による構造検討

第2章では、シミュレーション計算と導波路解析を併用して、深紫外レーザダイオードの構造検討を行った。コア層の Al 組成は利得、光閉じ込め係数、内部損失に大きく影響し、

コア層の Al 組成の選択が低閾値化において重要であることを示した。また、注入効率の低下の要因について精査し、電子リークに加え、コア層におけるキャリア再結合も注入効率の低下の一因になっていることを示した。

第3章 EBL および Mg ドーピングの導入による注入効率の改善

第 3 章では、p 側コア層に EBL と適当な Mg ドーピングを導入することで、注入効率が顕著に改善することを実験的に示した。最適な Mg ドーピングを施した試料において、ノンドープ試料のおよそ 10 倍の注入効率を得られた。このときの注入効率は 20%以上と推定される。これは UVB-LD における注入効率の報告値 3.5%を大きく上回る値であり、深紫外レーザーダイオードの低閾値化、さらなる短波長化において非常に重要な知見である。

また、シミュレーション計算を用いて、p 側コア層への Mg ドーピングによる注入効率の改善機構について検討を行った。シミュレーション計算より、注入効率の改善は、伝導帯のコア/クラッド層界面に生じるディップの観点から説明されることを示した。組成差の大きいコア/クラッド層界面には巨大な正の分極電荷が生じ、これにより伝導帯に深いディップが形成される。ディップの形成により電子ブロック層を兼ねる p 側クラッド層の電子に対する障壁高さが減少することで注入効率が低下する。コア/クラッド層界面近傍に反対符号を有するイオン化 Mg を配置することでディップが抑制され、注入効率が改善することが期待される。シミュレーション計算より、コア/クラッド層界面近傍にイオン化 Mg を配置することにより、注入効率が顕著に改善し得ることを示した。

第4章 活性化エネルギーのアクセプタ濃度・電界強度依存性

第 3 章において、コア/クラッド層界面近傍にイオン化 Mg を配置することによって、注入効率が顕著に改善し得ることを確認した。なお、Mg の活性化エネルギーは高く、通常の場合においては、注入効率の改善に寄与し得るイオン化 Mg 濃度を得ることは困難である。なお、コア/クラッド層界面近傍には、コア/クラッド層界面の分極電荷により、強力な電界が生じている。第 4 章では、Mg の活性化エネルギーをアクセプタ濃度、及び、電界強度の関数として記述する計算モデルを提案した。この計算モデルを用いて、プール・フレンケル効果を考慮することで、注入効率の向上に寄与し得るイオン化 Mg 濃度を達成し得ることを示した。

第5章 深紫外 LD デバイスの作製

第 5 章では、LD プロセスにより共振器構造を形成し、室温・パルス駆動で電流注入を行い、EL 特性の評価を行った。レーザ発振は確認されなかったが、 100 kA/cm^2 を超える大電流注入を達成した。また、p 側コア層に電子ブロック層と Mg ドーピングを導入した試料において、共振器構造での高電流注入条件においても、高い注入効率が得られることを確認した。このとき、EBL、Mg ドーピングを導入しなかった試料と比較して、20 倍以上の光出力が得られた。

参考文献

1. M. A. Khan, D. P. Lagunas, and M. A. Khan, "AlGaIn multiple quantum well based deep UV LEDs and their applications," *Phys. Status Solidi Appl. Mater. Sci.* **203**(7), 1764–1770 (2006).
2. H. Peng, E. Makarona, Y. He, Y. K. Song, A. V. Nurmikko, J. Su, Z. Ren, M. Gherasimova, S. R. Jeon, G. Cui, and J. Han, "Ultraviolet light-emitting diodes operating in the 340 nm wavelength range and application to time-resolved fluorescence spectroscopy," *Appl. Phys. Lett.* **85**(8), 1436–1438 (2004).
3. Q. Li, P. K. Dasgupta, H. Temkin, M. H. Crawford, A. J. Fischer, A. A. Allerman, K. H. A. Bogart, and S. R. Lee, "spectroscopic techniques Mid-ultraviolet Light-Emitting Diode Detects Dipicolinic Acid," *Appl. Spectrosc.* **58**(11), 1360 (2004).
4. P. Vita, N. Kurilčik, S. Juršenai, A. Žukauskas, A. Lunev, Y. Bilenko, J. Zhang, X. Hu, J. Deng, T. Katona, and R. Gaska, "Deep-ultraviolet light-emitting diodes for frequency domain measurements of fluorescence lifetime in basic biofluorophores," *Appl. Phys. Lett.* **87**(8), 084106 (2005).
5. G. C. Bhar and U. Chatterjee, "Development of ultraviolet laser for disinfection of potable water," *Indian J. Phys.* **80**(5), 517–521 (2006).
6. S. Vilhunen, H. Särkkä, and M. Sillanpää, "Ultraviolet light-emitting diodes in water disinfection," *Environ. Sci. Pollut. Res.* **16**(4), 439–442 (2009).
7. M. Raeiszadeh and B. Adeli, "A Critical Review on Ultraviolet Disinfection Systems against COVID-19 Outbreak: Applicability, Validation, and Safety Considerations," *ACS Photonics* **7**, 2941–2951 (2020).
8. Y. Gerchman, H. Mamane, N. Friedman, and M. Mandelboim, "UV-LED disinfection of Coronavirus: Wavelength effect," *J. Photochem. Photobiol. B Biol.* **212**, 112044 (2020).
9. M. Kneissl, T. Y. Seong, J. Han, and H. Amano, "The emergence and prospects of deep-ultraviolet light-emitting diode technologies," *Nat. Photonics* **13**(4), 233–244 (2019).
10. K. Nagata, H. Makino, T. Yamamoto, K. Kataoka, T. Narita, and Y. Saito, "Low resistivity of highly Si-doped n-Type Al_{0.62}Ga_{0.38}N layer by suppressing self-compensation," *Appl. Phys. Express* **13**, 025504 (2020).
11. C. De Santi, S. Einfeldt, M. Funato, H. Amano, J. Glaab, S. Hagedorn, A. Hirano, H. Hirayama, R. Ishii, Y. Kashima, Y. Kawakami, R. Kirste, M. Kneissl, F. Mehnke, M. Meneghini, A. Ougazzaden, and J. Peter, "The 2020 UV emitter roadmap," *J. Phys. D: Appl. Phys.* **53**, 503001 (2020).
12. D. Li, K. Jiang, X. Sun, and C. Guo, "AlGaIn photonics: recent advances in materials and ultraviolet devices," *Adv. Opt. Photonics* **10**(1), 43 (2018).
13. I. V. Rozhansky and D. A. Zakheim, "Analysis of the causes of the decrease in the

- electroluminescence efficiency of AlGaInN light-emitting-diode heterostructures at high pumping density," *Semiconductors* **40**(7), 839–845 (2006).
14. K. Ban, J. I. Yamamoto, K. Takeda, K. Ide, M. Iwaya, T. Takeuchi, S. Kamiyama, I. Akasaki, H. Amano, K. Ide, K. Takeda, J. I. Yamamoto, T. Takeuchi, I. Akasaki, M. Iwaya, H. Amano, and K. Ban, "Internal quantum efficiency of whole-composition-range AlGaIn multi-quantum wells," *Appl. Phys. Express* **4**(5), 052101 (2011).
 15. J. Yu, Z. Hao, L. Li, L. Wang, Y. Luo, J. Wang, C. Sun, Y. Han, B. Xiong, and H. Li, "Influence of dislocation density on internal quantum efficiency of GaN-based semiconductors," *AIP Adv.* **7**(3), 035321 (2017).
 16. S. Tanaka, Y. Kawase, S. Teramura, S. Iwayama, K. Sato, S. Yasue, T. Omori, M. Iwaya, T. Takeuchi, S. Kamiyama, I. Akasaki, and H. Miyake, "Effect of dislocation density on optical gain and internal loss of AlGaIn-based ultraviolet-B band lasers," *Appl. Phys. Express* **13**(4), 045504 (2020).
 17. Z. L. Liao, R. L. Aggarwal, P. A. Maki, R. J. Molnar, J. N. Walpole, and R. C. Williamson, "Light scattering in high-dislocation-density GaN," *Appl. Phys. Lett.* **69**, 1665 (1996).
 18. H. Miyake, G. Nishio, S. Suzuki, K. Hiramatsu, H. Fukuyama, J. Kaur, and N. Kuwano, "Annealing of an AlN buffer layer in N₂-CO for growth of a high-quality AlN film on sapphire," *Appl. Phys. Express* **9**, 025501 (2016).
 19. Y. Itokazu, S. Kuwaba, M. Jo, N. Kamata, and H. Hirayama, "Influence of the nucleation conditions on the quality of AlN layers with high-temperature annealing and regrowth processes," *Jpn. J. Appl. Phys.* **58**, SC1056 (2019).
 20. K. Uesugi, Y. Hayashi, K. Shojiki, and H. Miyake, "Reduction of threading dislocation density and suppression of cracking in sputter-deposited AlN templates annealed at high temperatures," *Appl. Phys. Express* **12**, 065501 (2019).
 21. S. Walde, S. Hagedorn, and M. Weyers, "Impact of intermediate high temperature annealing on the properties of AlN/sapphire templates grown by metalorganic vapor phase epitaxy," *Jpn. J. Appl. Phys.* **58**, SC1002 (2019).
 22. S. Hagedorn, S. Walde, A. Mogilatenko, M. Weyers, L. Cancellara, M. Albrecht, and D. Jaeger, "Stabilization of sputtered AlN/sapphire templates during high temperature annealing," *J. Cryst. Growth* **512**, 142–146 (2019).
 23. S. Tanaka, K. Shojiki, K. Uesugi, Y. Hayashi, and H. Miyake, "Quantitative evaluation of strain relaxation in annealed sputter-deposited AlN film," *J. Cryst. Growth* **512**, 16–19 (2019).
 24. S. Kuboya, K. Uesugi, K. Shojiki, Y. Tezen, K. Norimatsu, and H. Miyake, "Crystalline quality improvement of face-to-face annealed MOVPE-grown AlN on vicinal sapphire substrate with sputtered nucleation layer," *J. Cryst. Growth* **545**, 125722 (2020).
 25. K. Uesugi, K. Shojiki, Y. Tezen, Y. Hayashi, and H. Miyake, "Suppression of dislocation-induced

- spiral hillocks in MOVPE-grown AlGaIn on face-to-face annealed sputter-deposited AlN template," *Appl. Phys. Lett.* **116**, 062101 (2020).
26. K. Uesugi and H. Miyake, "Fabrication of AlN templates by high-temperature face-to-face annealing for deep UV LEDs," *Jpn. J. Appl. Phys.* **60**, 120502 (2021).
 27. D. Wang, K. Uesugi, S. Xiao, K. Norimatsu, and H. Miyake, "Low dislocation density AlN on sapphire prepared by double sputtering and annealing," *Appl. Phys. Express* **13**, 095501 (2020).
 28. H. Murotani, A. Fujii, R. Oshimura, T. Kusaba, K. Uesugi, H. Miyake, and Y. Yamada, "Extremely high internal quantum efficiency of AlGaIn-based quantum wells on face-to-face annealed sputter-deposited AlN templates," *Appl. Phys. Express* **14**, 122004 (2021).
 29. N. Susilo, S. Hagedorn, D. Jaeger, H. Miyake, U. Zeimer, C. Reich, B. Neuschulz, L. Sulmoni, M. Guttman, F. Mehnke, C. Kuhn, T. Wernicke, M. Weyers, M. Kneissl, F. Mehnke, B. Neuschulz, M. Kneissl, S. Hagedorn, L. Sulmoni, D. Jaeger, N. Susilo, C. Kuhn, H. Miyake, C. Reich, and U. Zeimer, "AlGaIn-based deep UV LEDs grown on sputtered and high temperature annealed AlN/sapphire," *Appl. Phys. Lett.* **112**(4), 041110 (2018).
 30. N. Susilo, E. Ziffer, S. Hagedorn, L. Cancellara, C. Netzel, N. L. Ploch, S. Wu, J. Rass, S. Walde, L. Sulmoni, M. Guttman, T. Wernicke, M. Albrecht, M. Weyers, and M. Kneissl, "Improved performance of UVC-LEDs by combination of high-temperature annealing and epitaxially laterally overgrown AlN/sapphire," *Photonics Res.* **8**(4), 589 (2020).
 31. M. Leroux, P. Vennéguès, S. Dalmaso, M. Benaissa, E. Feltin, P. De Mierry, B. Beaumont, B. Damilano, N. Grandjean, and P. Gibart, "Structural defects and relation with optoelectronic properties in highly Mg-doped GaN," *Phys. Status Solidi Appl. Res.* **192**(2), 394–400 (2002).
 32. J. L. Lyons and C. G. Van De Walle, "Computationally predicted energies and properties of defects in GaN," *npj Comput. Mater.* **3**, 12 (2017).
 33. Y. Zhang, W. Liu, and H. Niu, "Native defect properties and p -type doping efficiency in group-IIA doped wurtzite AlN," *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.* **77**(3), 035201 (2008).
 34. Z. Zhang, M. Kushimoto, T. Sakai, N. Sugiyama, L. J. Schowalter, C. Sasaoka, and H. Amano, "A 271.8 nm deep-ultraviolet laser diode for room temperature operation," *Appl. Phys. Express* **12**, 124003 (2019).
 35. K. Sato, S. Yasue, K. Yamada, S. Tanaka, T. Omori, S. Ishizuka, S. Teramura, Y. Ogino, S. Iwayama, H. Miyake, M. Iwaya, T. Takeuchi, S. Kamiyama, and I. Akasaki, "Room-Temperature operation of AlGaIn ultraviolet-B laser diode at 298 nm on lattice-relaxed Al_{0.6}Ga_{0.4}N/AlN/sapphire," *Appl. Phys. Express* **13**, 031004 (2020).
 36. S. M. N. Hasan, W. You, M. S. I. Sumon, and S. Arafin, "Recent progress of electrically pumped AlGaIn diode lasers in the uv-b and-c bands," *Photonics* **8**, 267 (2021).
 37. T. Omori, S. Ishizuka, S. Tanaka, S. Yasue, K. Sato, Y. Ogino, S. Teramura, K. Yamada, S. Iwayama, H. Miyake, M. Iwaya, T. Takeuchi, S. Kamiyama, and I. Akasaki, "Internal loss of

- AlGaIn-based ultraviolet-B band laser diodes with p-type AlGaIn cladding layer using polarization doping," *Appl. Phys. Express* **13**, 071008 (2020).
38. T. Sakai, M. Kushimoto, Z. Zhang, N. Sugiyama, L. J. Schowalter, Y. Honda, C. Sasaoka, and H. Amano, "On-wafer fabrication of etched-mirror UV-C laser diodes with the ALD-deposited DBR," *Appl. Phys. Lett.* **116**, 122101 (2020).
 39. M. Kushimoto, Z. Zhang, N. Sugiyama, Y. Honda, L. J. Schowalter, C. Sasaoka, and H. Amano, "Impact of heat treatment process on threshold current density in AlGaIn-based deep-ultraviolet laser diodes on AlN substrate," *Appl. Phys. Express* **14**, 051003 (2021).
 40. S. Tanaka, Y. Ogino, K. Yamada, T. Omori, R. Ogura, S. Teramura, M. Shimokawa, S. Ishizuka, A. Yabutani, S. Iwayama, K. Sato, H. Miyake, M. Iwaya, T. Takeuchi, S. Kamiyama, and I. Akasaki, "AlGaIn-based UV-B laser diode with a high optical confinement factor," *Appl. Phys. Lett.* **118**, 163504 (2021).
 41. K. Sato, T. Omori, K. Yamada, S. Tanaka, S. Ishizuka, S. Teramura, S. Iwayama, M. Iwaya, H. Miyake, T. Takeuchi, S. Kamiyama, and I. Akasaki, "Analysis of carrier injection efficiency of AlGaIn UV-B laser diodes based on the relationship between threshold current density and cavity length," *Jpn. J. Appl. Phys.* **60**, 074002 (2021).
 42. S. Tanaka, Y. Ogino, K. Yamada, R. Ogura, S. Teramura, M. Shimokawa, S. Ishizuka, S. Iwayama, K. Sato, H. Miyake, M. Iwaya, T. Takeuchi, and S. Kamiyama, "Low-threshold-current (~85 mA) of AlGaIn-based UV-B laser diode with refractive-index waveguide structure," *Appl. Phys. Express* **14**, 094009 (2021).
 43. Z. Zhang, M. Kushimoto, A. Yoshikawa, K. Aoto, L. J. Schowalter, C. Sasaoka, and H. Amano, "Continuous-wave lasing of AlGaIn-based ultraviolet laser diode at 274.8 nm by current injection," *Appl. Phys. Express* **15**, 041007 (2022).
 44. Y. Kawase, S. Ikeda, Y. Sakuragi, S. Yasue, S. Iwayama, M. Iwaya, T. Takeuchi, S. Kamiyama, I. Akasaki, and H. Miyake, "Ultraviolet-B band lasers fabricated on highly relaxed thick Al_{0.55}Ga_{0.45}N films grown on various types of AlN wafers," *Jpn. J. Appl. Phys.* **58**, SC1052 (2019).
 45. R. Dalmau, B. Moody, R. Schlessler, S. Mita, J. Xie, M. Feneberg, B. Neuschl, K. Thonke, R. Collazo, A. Rice, J. Tweedie, and Z. Sitar, "Growth and Characterization of AlN and AlGaIn Epitaxial Films on AlN Single Crystal Substrates," *J. Electrochem. Soc.* **158**(5), H530 (2011).
 46. H. Miyake, C. H. Lin, K. Tokoro, and K. Hiramatsu, "Preparation of high-quality AlN on sapphire by high-temperature face-to-face annealing," *J. Cryst. Growth* **456**, 155–159 (2016).
 47. K. Nagamatsu, X. Liu, K. Uesugi, and H. Miyake, "Improved emission intensity of UVC-LEDs from using strain relaxation layer on sputter-annealed AlN," *Jpn. J. Appl. Phys.* **58**, SCCC07 (2019).
 48. Y. Itokazu, Y. Mogami, S. Kuwaba, S. Motegi, A. Osawa, A. Maeoka, K. Osaki, Y. Tanioka, M.

- Jo, N. Kamata, and H. Hirayama, "Influence of the Strain Relaxation on the Optical Property of AlGaIn Quantum Wells," *Phys. Status Solidi* **257**(4), 1900582 (2020).
49. J. Simon, V. Protasenko, C. Lian, H. Xing, and D. Jena, "Polarization-induced hole doping in wide-band-gap uniaxial semiconductor heterostructures," *Science* **327**, 60–64 (2010).
 50. M. Martens, C. Kuhn, T. Simoneit, S. Hagedorn, A. Knauer, T. Wernicke, M. Weyers, and M. Kneissl, "The effects of magnesium doping on the modal loss in AlGaIn-based deep UV lasers," *Appl. Phys. Lett.* **110**, 081103 (2017).
 51. S. Y. Davydov, "Evaluation of physical parameters for the group III nitrides: BN, AlN, GaN, and InN," *Semiconductors* **36**(1), 41–44 (2002).
 52. B. Witzigmann, V. Laino, M. Luisier, F. Roemer, G. Feicht, and U. T. Schwarz, "Simulation and design of optical gain in In(Al)GaIn/GaN short wavelength lasers," *Semicond. Lasers Laser Dyn. II* **6184**, 61840E (2006).
 53. K. Kojima, M. Funato, Y. Kawakami, H. Braun, U. Schwarz, S. Nagahama, and T. Mukai, "Inhomogeneously broadened optical gain spectra of InGaIn quantum well laser diodes," *Phys. Status Solidi Curr. Top. Solid State Phys.* **5**(6), 2126–2128 (2008).
 54. M. Zhou, F. Liang, and D. G. Zhao, "Effects of quantum well thickness and aluminum content of electron blocking layer on InGaIn-based laser diodes," *J. Mater. Sci. Mater. Electron.* **31**(8), 5814–5819 (2020).
 55. G. E. Dialynas, G. Deligeorgis, M. Zervos, and N. T. Pelekanos, "Internal field effects on the lasing characteristics of InGaIn/GaN quantum well lasers," *J. Appl. Phys.* **104**(11), 1–8 (2008).
 56. Q. Guo, R. Kirste, P. Reddy, S. Mita, Y. Guan, R. Collazo, Z. Sitar, and Z. Guo, Qiang and Kirste, Ronny and Reddy, Pramod and Mita, Seiji and Guan, Yan and Collazo, Ramon and Sitar, "Quantum well-width dependence study on AlGaIn based UVC laser," 2019 IEEE Res. Appl. Photonics Def. Conf. 1–4 (2019).
 57. Z. Zhang, M. Kushimoto, T. Sakai, N. Sugiyama, L. J. Schowalter, C. Sasaoka, and H. Amano, "Design and characterization of a low-optical-loss UV-C laser diode," *Jpn. J. Appl. Phys.* **59**, 094001 (2020).
 58. Y. Itokazu, N. Maeda, H. Yaguchi, and H. Hirayama, "Significant improvement of injection efficiency in deep-UV LD structures by light Mg doping in p-core layer," *Jpn. J. Appl. Phys.* (2023) (in press).
 59. T. Li, C. Simbrunner, M. Wegscheider, A. Navarro-Quezada, M. Quast, K. Schmidegg, and A. Bonanni, "GaIn:δ-Mg grown by MOVPE: Structural properties and their effect on the electronic and optical behavior," *J. Cryst. Growth* **310**, 13–21 (2008).
 60. T. Kinoshita, T. Obata, H. Yanagi, and S. I. Inoue, "High p-type conduction in high-Al content Mg-doped AlGaIn," *Appl. Phys. Lett.* **102**, 012105 (2013).
 61. H. Xing, D. S. Green, H. Yu, T. Mates, P. Kozodoy, S. Keller, S. P. Denbaars, and U. K. Mishra,

- "Memory effect and redistribution of Mg into sequentially regrown GaN layer by metalorganic chemical vapor deposition," *Jpn. J. Appl. Phys.* **42**, 50 (2003).
62. K. Tomita, K. Itoh, O. Ishiguro, T. Kachi, and N. Sawaki, "Reduction of Mg segregation in a metalorganic vapor phase epitaxial grown GaN layer by a low-temperature AlN interlayer," *J. Appl. Phys.* **104**, 014906 (2008).
 63. K. Sato, K. Yamada, K. Sakowski, M. Iwaya, T. Takeuchi, S. Kamiyama, Y. Kangawa, P. Kempisty, S. Krukowski, J. Piechota, and I. Akasaki, "Effects of Mg dopant in Al-composition-graded $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($0.45 \leq x$) on vertical electrical conductivity of ultrawide bandgap AlGaIn p-n junction," *Appl. Phys. Express* **14**, 096503 (2021).
 64. J. Frenkel, "On pre-breakdown phenomena in insulators and electronic semi-conductors," *Phys. Rev.* **54**, 647 (1938).
 65. J. L. Hartke, "The Three-Dimensional Poole-Frenkel Effect," *J. Appl. Phys.* **39**, 4871 (1968).
 66. M. Le Gallo, M. Kaes, A. Sebastian, and D. Krebs, "Subthreshold electrical transport in amorphous phase-change materials," *New J. Phys.* **17**, 093035 (2015).
 67. M. Kaes, M. Le Gallo, A. Sebastian, M. Salinga, and D. Krebs, "High-field electrical transport in amorphous phase-change materials," *J. Appl. Phys.* **118**, 135707 (2015).
 68. A. Muhin, M. Guttmann, C. Kuhn, E. Mickein, J. R. Aparici, E. Ziffer, N. Susilo, L. Sulmoni, T. Wernicke, and M. Kneissl, "Vertical conductivity and Poole-Frenkel-ionization of Mg acceptors in AlGaIn short-period superlattices with high Al mole fraction," *Appl. Phys. Lett.* **117**, 252101 (2020).
 69. S. Brochen, J. Brault, S. Chenot, A. Dussaigne, M. Leroux, and B. Damilano, "Dependence of the Mg-related acceptor ionization energy with the acceptor concentration in p-type GaN layers grown by molecular beam epitaxy," *Appl. Phys. Lett.* **103**, 032102 (2013).
 70. F. Mehnke, C. Kuhn, M. Guttmann, C. Reich, T. Kolbe, V. Kueller, A. Knauer, M. Lapeyrade, S. Einfeldt, J. Rass, T. Wernicke, M. Weyers, and M. Kneissl, "Efficient charge carrier injection into sub-250 nm AlGaIn multiple quantum well light emitting diodes," *Appl. Phys. Lett.* **105**(5), 051113 (2014).
 71. W. Götz, R. S. Kern, C. H. Chen, H. Liu, D. A. Steigerwald, and R. M. Fletcher, "Hall-effect characterization of III-V nitride semiconductors for high efficiency light emitting diodes," *Mater. Sci. Eng. B* **59**, 211–217 (1999).
 72. P. Kozodoy, S. P. DenBaars, and U. K. Mishra, "Depletion region effects in Mg-doped GaN," *J. Appl. Phys.* **87**, 770–775 (2000).
 73. P. Kozodoy, H. Xing, S. P. DenBaars, U. K. Mishra, A. Saxler, R. Perrin, S. Elhamri, and W. C. Mitchel, "Heavy doping effects in Mg-doped GaN," *J. Appl. Phys.* **87**, 1832–1835 (2000).
 74. J. W. Huang, T. F. Kuech, H. Lu, and I. Bhat, "Electrical characterization of Mg-doped GaN grown by metalorganic vapor phase epitaxy," *Appl. Phys. Lett.* **68**, 2392 (1996).

75. K. A. Bulashevich, S. Y. Karpov, and R. A. Suris, "Analytical model for the quantum-confined Stark effect including electric field screening by non-equilibrium carriers," *Phys. Status Solidi Basic Res.* **243**(7), 1625–1629 (2006).
76. W. Götz, N. M. Johnson, J. Walker, D. P. Bour, and R. A. Street, "Activation of acceptors in Mg-doped GaN grown by metalorganic chemical vapor deposition," *Appl. Phys. Lett.* **68**, 667 (1996).
77. B. Šantić, "Statistics of the Mg acceptor in GaN in the band model," *Semicond. Sci. Technol.* **21**(10), 1484 (2006).
78. B. Šantić, "On the determination of the statistical characteristics of the magnesium acceptor in GaN," *Superlattices Microstruct.* **36**(4), 445–453 (2004).
79. Y. Nakano, O. Fujishima, and T. Kachi, "Effect of p-type activation ambient on acceptor levels in Mg-doped GaN," *J. Appl. Phys.* **96**, 415 (2004).
80. L. Konczewicz, E. Litwin-Staszewska, S. Contreras, R. Piotrkowski, and L. Dmowski, "Electrical transport phenomena in magnesium-doped p-type GaN," *Phys. Status Solidi Basic Res.* **246**(3), 658–663 (2009).
81. H. Nakayama, P. Hacke, M. R. H. Khan, T. Detchprohm, K. H. K. Hiramatsu, and N. S. N. Sawaki, "Electrical Transport Properties of p-GaN," *Jpn. J. Appl. Phys.* **35**(3A), L282 (1996).
82. N. D. Nguyen, M. Germain, M. Schmeits, B. Schineller, and M. Heuken, "Thermal admittance spectroscopy of Mg-doped GaN Schottky diodes," *J. Appl. Phys.* **90**(2), 985–993 (2001).
83. T. Tanaka, A. Watanabe, H. Amano, Y. Kobayashi, I. Akasaki, S. Yamazaki, and M. Koike, "p - type conduction in Mg-doped GaN and vapor phase epitaxy," **65**, 593 (1994).
84. R. R. Lieten, V. Motsnyi, L. Zhang, K. Cheng, M. Leys, S. Degroote, G. Buchowicz, O. Dubon, and G. Borghs, "Mg doping of GaN by molecular beam epitaxy," *J. Phys. D. Appl. Phys.* **44**(13), 135406 (2011).
85. D. J. Kim, D. Y. Ryu, N. A. Bojarczuk, J. Karasinski, S. Guha, S. H. Lee, and J. H. Lee, "Thermal activation energies of Mg in GaN:Mg measured by the Hall effect and admittance spectroscopy," *J. Appl. Phys.* **88**(5), 2564–2569 (2000).
86. M. Leroux, N. Grandjean, B. Beaumont, G. Nataf, F. Semond, J. Massies, and P. Gibart, "Temperature quenching of photoluminescence intensities in undoped and doped GaN," *J. Appl. Phys.* **86**(7), 3721–3728 (1999).
87. G. Namkoong, E. Trybus, K. K. Lee, M. Moseley, W. A. Doolittle, and D. C. Look, "Metal modulation epitaxy growth for extremely high hole concentrations above 10^{19} cm^{-3} in GaN," *Appl. Phys. Lett.* **93**, 172112 (2008).
88. S. Nikishin, I. Chary, B. Borisov, V. Kuryatkov, Y. Kudryavtsev, R. Asomoza, S. Y. Karpov, and M. Holtz, "Mechanism of carrier injection in (Ni/Au) /p -Al_x Ga_{1-x} N:Mg ($0 \leq x < 0.1$) Ohmic contacts," *Appl. Phys. Lett.* **95**, 163502 (2009).
89. S. K. Chun, "Screening effects on the degree of ionization and hole mobility for p -type Si and

- Ge," J. Appl. Phys. **80**, 4773 (1996).
90. T. F. L. and T. C. McGill, "Variation of impurity – to – band activation energies with impurity density," J. Appl. Phys. **46**, 373 (1975).
91. C. Y. Chang, M. C. Wu, Y. K. Su, C. Y. Nee, and K. Y. Cheng, "The doping concentration dependence of the zinc acceptor ionization energy in In_{0.49}Ga_{0.51}P," J. Appl. Phys. **58**, 3907–3908 (1985).

謝辞

本研究を遂行するにあたり、終始御指導・御鞭撻いただきました矢口裕之教授、八木修平准教授、藤川紗千恵助教、鎌田憲彦教授、国立研究開発法人理化学研究所の平山秀樹主任研究員に心より感謝申し上げます。また、本学在学学生、仲元寺院生をはじめとする矢口・八木・藤川研究室の皆様、並びに、前田哲利博士、定昌史博士、Khan Muhammad 博士をはじめとする平山量子光素子研究チームの皆様に厚く御礼申し上げます。

本研究は理研の大学院生リサーチ・アソシエイト制度の下での成果です。

研究業績

学術論文

- (1) Y. Itokazu, S. Kuwaba, M. Jo, N. Kamata, H. Hirayama, "Influence of the nucleation conditions on the quality of AlN layers with high temperature annealing and regrowth processes", Japanese Journal of Applied Physics, 58, SC1056, (2019)
- (2) Y. Itokazu, Y. Mogami, S. Kuwaba, S. Motegi, A. Osawa, A. Maeoka, K. Osaki, Y. Tanioka, M. Jo, N. Kamata, H. Hirayama, "Influence of the Strain Relaxation on the Optical Property of AlGa_N Quantum Wells", physica status solidi (b), 257, 1900582, (2020)
- (3) Y. Itokazu, N. Maeda, H. Yaguchi, H. Hirayama, "Significant Improvement of Injection Efficiency in Deep-UV LD Structures by Light Mg Doping in p-Core Layer", Japanese Journal of Applied Physics, (2023) (in press)

国際会議

- (1) Y. Itokazu, M. Jo, S. Minami, H. Hirayama, "UVC LEDs on AlN/sapphire templates prepared by high temperature annealing and regrowth process", International Symposium on Growth of III-

Nitrides, Mo4.2, Warsaw, Poland, (August 2018)

- (2) Y. itokazu, S. Kuwaba, M. Jo, N. Kamata, H. Hirayama, “Influence of the nucleation conditions on the quality of AlN layers with high-temperature annealing and regrowth processes”, International Workshop on Nitride Semiconductors, TuP-GR-8, Kanazawa, Japan, (November 2018)
- (3) Y. itokazu, Y. Mogami, S. Kuwaba, S. Motegi, A. Osawa, K. Osaki, Y. Tanioka, M. Jo, N. Kamata, H. Hirayama, “Influence of the strain relaxation on the optical property of AlGaIn quantum wells”, 13th International Conference on Nitride Semiconductors 2019, IP01.08 Washington, USA, (July 2019)
- (4) Y. Itokazu, S. Kuwaba, M. Jo, N. Kamata, H. Hirayama, “Investigation of AlGaIn/AlN interface structure and annealing effect for control of strain relaxation”, The 9th Asia-Pacific Workshop on Wide gap Semiconductors, ThP-GR-12, Okinawa, Japan, (November 2019)
- (5) Y. Itokazu, N. Maeda, H. Yaguchi, and H. Hirayama, “Simulation of injection efficiency and net modal gain in 250-300 nm AlGaIn deep-UV laser diodes”, International Conference on Metal Organic Vapor Phase Epitaxy, P64, Stuttgart, Germany, (July 2022)
- (6) Y. Itokazu, N. Maeda, H. Yaguchi and H. Hirayama, “Significant Improvement of Injection Efficiency in Deep-UV LD Structures by Light Mg Doping in p-Core Layer”, International Conference on Solid State Devices and Materials, A-5-05, Chiba, Japan, (September 2022).
- (7) Y. Itokazu, N. Maeda, H. Yaguchi and H. Hirayama, “Simulation of net modal gain in 250-300 nm AlGaIn deep-UV laser diodes”, International Workshop on Nitride Semiconductors, AT 188, Berlin, Germany, (October 2022).

国内会議

- (1) 糸数雄吏、桑葉俊輔、定昌史、鎌田憲彦、平山秀樹、「高温アニール・再成長により作製した AlN の結晶性に及ぼす核形成条件の影響」、第 79 回応用物理学会秋季学術講演会、19p-146-12、名古屋、2018 年、9 月
- (2) 糸数雄吏、桑葉俊輔、定昌史、鎌田憲彦、平山秀樹、「高温アニール処理 AlN 上に作製した UVC-LED の高効率動作」、第 110 回研究会・特別公開シンポジウム、P20、駒場、

2018 年、9 月

- (3) 糸数雄吏、桑葉俊輔、定昌史、鎌田憲彦、平山秀樹、「AlGa_N 歪制御に向けた AlGa_N/AlN 界面構造とアニール効果の検討」、第 80 回応用物理学会秋季学術講演会、18a-PB3-11、札幌、2019 年、9 月
- (4) 糸数雄吏、前田哲利、矢口裕之、平山秀樹、「AlGa_N 系深紫外 LD のネットモード利得の波長依存性の解析」、第 69 回応用物理学会春季学術講演会、26p-E203-10、相模原、2022 年、3 月
- (5) 糸数雄吏、前田哲利、定昌史、矢口裕之、「AlGa_N 系深紫外 LD 構造におけるコア層への Mg ドーピング効果」、第 83 回応用物理学会秋季学術講演会、22p-C200-7、仙台、2022 年、9 月