



Title	First-Principles Study on Electronic and Optical Properties of III-V Nitrides
Author(s)	鈴木, 政勝
Citation	大阪大学, 1997, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/40412">https://hdl.handle.net/11094/40412</a>
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed</a> 大阪大学の博士論文について

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏名	鈴木政勝
博士の専攻分野の名称	博士(理学)
学位記番号	第13279号
学位授与年月日	平成9年3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第2項該当
学位論文名	First-Principles Study on Electronic and Optical Properties of III-V Nitrides (III-V族窒化物半導体の電子物性と光物性に関する第一原理的研究)
論文審査委員	(主査) 教授 鈴木直 (副査) 教授 張紀久夫 教授 冷水佐壽 教授 吉田博 助教授 杉野隆 助教授 白井正文

### 論文内容の要旨

GaN をはじめとするIII-V族窒化物半導体は、赤色から紫外光までの広い波長領域をカバーする発光素子材料として長年研究が続けられてきた。特に、高輝度青色発光ダイオードの実用化、電流注入による量子井戸レーザの室温発振により、短波長レーザ用材料の有力候補として今後の発展が期待されている。一般に、レーザ等の半導体デバイスの解析には  $k \cdot p$  摂動論が用いられる。しかし、有効質量等の  $k \cdot p$  摂動論に必要な物性定数のほとんどが未知であり、また、その結晶構造が従来の半導体レーザ (GaAs系, ZnSe系等) の閃亜鉛鉱 (ZB) 型とは異なるウルツ鉱 (WZ) 型であるため、基礎的な電子物性、光物性やレーザ特性に関する理論的研究はほとんどなされていない。

本論文では、第一原理計算と  $k \cdot p$  摂動論を組み合わせることにより、GaN, AlNの未知の物性定数を決定し、III-V族窒化物半導体の電子物性と光物性を解析した。また、それらを用いてGaN/AlGaN量子井戸のサブバンド構造と光学利得を計算した。その結果、III-V族窒化物半導体レーザ特有の問題点とその解決策を理論的に明らかにし、今後の材料/デバイス設計に重要な指針を与えた。本論文の主要な結果は以下のようにまとめられる。

- フルポテンシャル線形化補強平面波 (FLAPW) 法を用いた第一原理電子帯構造計算により、WZ型、並びにZB型のGaN, AlNの電子状態を明らかにした。また、結晶の対称性の観点から、歪みによる電子状態の変化に関する理解を得た。

- $C_{6v}$ の対称性を考慮した  $k \cdot p$  摂動論に基づいて、WZ型の  $k \cdot p$ 、及び歪みハミルトニアンを導出した。有効質量の  $k$ -依存性、エネルギー準位の歪み変化、光学遷移行列要素等を解析的に求め、従来のZB型半導体との違いを明らかにした。

- 第一原理計算より求めたバンド端の電子帯構造を、 $k \cdot p$ 、及び歪みハミルトニアンを用いて再現することにより、有効質量、結晶場分裂幅、スピントラニッシュ (Luttinger) パラメータ、変形ポテンシャル、光学遷移行列要素を導出した。測定値が存在するものについては計算値と良く一致している。

- [0001] 方向に積層したWZ型、並びに[001] 方向に積層したZB型GaN/AlGaN量子井戸のサブバンド構造と光学利得を計算した。窒素の強い電子親和力と弱いスピントラニッシュ作用のため、WZ型、ZB型のどちらの場合もバンド端の状態密度が非常に大きい。そのため、反転分布を得るために非常に大きなキャリア密度を要し、レーザのしきい値キャリア密度は従来のZB型レーザと比べてかなり高くなる。

- ・サブバンド構造、光学利得のヘテロ接合面内歪み依存性を解析した。WZ型の場合、二軸性歪みによるレーザのしきい値低減効果はほとんどみられないが、六方晶特有の [0001] 面内一軸性歪みによって大幅なしきい値低減と微分利得の向上が期待される。一方、ZB型の場合、従来のレーザと同様に二軸性歪みがしきい値低減に有効であるが、WZ型と比べてしきい値が高い。

### 論文審査の結果の要旨

本論文では、先ず最初に、フルポテンシャル線形化補強平面波 (FLAPW) 法を用いた第一原理電子帯構造計算により、GaN, AlN の電子状態を求めるとともに歪みによる電子状態の変化を解明した。さらに、有効質量近似に基づいて第一原理計算より求めたバンド端の電子帯構造を再現することにより、有効質量、スピン軌道分裂幅、変形ポテンシャル、光学遷移行列要素などの重要なパラメーターを初めて決定した。計算で得られたパラメーターの値は測定値が存在するものとは良く一致している。なお、WZ型に対する有効質量ハミルトニアンの導出は本研究によって初めてなされた。

次に、[0001] 方向に積層したWZ型GaN/AlGaN 量子井戸のサブバンド構造を初めて計算すると同時にバンド間遷移による光学利得を計算して、反転分布を得るためにキャリア密度しきい値を求めた。その結果、窒素の強い電子親和力と弱いスピン-軌道相互作用によってバンド端の状態密度が非常に大きくなるため、キャリア密度しきい値は従来のZB型レーザと比べてかなり高いことを見いだした。さらに、[0001] 面内二軸性の歪みはキャリア密度しきい値をあまり減少させないが、[0001] 面内一軸性歪みによって大幅なしきい値低減が期待されることを明らかにした。

以上のように、本研究では第一原理計算に基づいてIII-V族窒化物半導体GaN, AlN の物性定数を初めて決定すると同時に、GaN/AlGaN 量子井戸のサブバンド構造およびそれに対する歪効果を解明し、今後の材料/デバイス設計に対する重要な知見も与えている。よって、本論文は物性物理学の発展に寄与するところが大きく、博士(理学)の学位論文として価値あるものと認める。