

デバイス材料工学

近藤担当分（光デバイス材料） 講義ノート

2024 年 12 月 2 日～2025 年 1 月 27 日

近藤高志

tkondo@castle.t.u-tokyo.ac.jp

0 はじめに

0.1 講義の目標

半導体デバイスの動作原理の基本を理解し、材料技術の果たす役割と意義を理解する。電子デバイスについては、pn 接合と CMOS を中心とした電子デバイスの動作原理、近年の AI をはじめとする新しい計算手法を実現する上で、材料の果たす役割とについて講義する（内田担当）。光デバイスについては、発光ダイオード・半導体レーザとフォトダイオード・太陽電池の動作原理、用いられる半導体材料の特性、特に化合物半導体の特徴とその応用について講義する（近藤担当）。なお、この講義の学習には、固体物性学と半導体物性学の内容の理解が不可欠である。必ずこれらの科目を履修した上で本講義に臨むこと。

0.2 教科書・参考書

この講義での教科書は指定しない。講義ノートと配布資料とで必要な範囲をカバーする予定である。なお、本講義の光デバイスの部分に関して、以下の参考書をあげておく。

- 「初歩から学ぶ固体物理学」矢口裕之著（講談社）312 ページ
固体物性学の講義で指定した教科書。非物理系の学生が固体物理学を学ぶための最高の教科書。この講義に関係するのは、「第 12 章 固体の光学的性質」と「第 14 章 半導体」。特に、半導体の章は材料的な視点でも書かれた良い内容で、他の教科書では勉強できない素晴らしい記述だと思う。ただし、これはあくまで固体物理の教科書。デバイスについては後述の参考著が必要である。
- 「Fundamentals of Photonics (Third edition), Part II: Photonics」Saleh, Teich 著（John Wiley & Sons）812 ページ
フォトリックデバイス分野の代表的教科書である。光学の基礎から半導体物理、各種光デバイスまで、一貫した記述でカバーした良書。この講義と関係するのは Part II の Chapter 14–19 だが、Part I: Optics（557 ページ）もあわせて勉強すると良いと思う。第 1 版の邦訳が出版されている（基本 光工学）が、改訂された本書を英語で読む方をお勧めする。

0.3 講義の概要と進め方

光デバイスについては近藤が月曜に、電子デバイスについては内田が木曜に講義をおこなう。近藤担当分は以下のスケジュールで 6 回おこなう予定である。

- 1) 12/ 2 (月) 光物性の基礎—光の吸収と放出
- 2) 12/ 9 (月) 半導体の光学特性—光吸収と発光
- 3) 12/16 (月) 半導体光デバイス材料—化合物半導体
- 4) 12/23 (月) 半導体発光デバイス I—発光ダイオード
- 5) 1/ 6 (月) 半導体発光デバイス II—半導体レーザ
- 6) 1/20 (月) 半導体受光デバイス
- 1/27 (月) 期末試験 (予定, 変更の可能性あり)

この講義では, (固体物性学と同様,) 数式が頻出することになる。講義では, 数式の表している意味・物理的描像を極力わかりやすく説明するつもりであるが, その内容をきちんと理解するためには, やはり, 講義に現れる式の展開をすべて自分で追ってみることが不可欠である。

この講義ノートの電子版は以下のウェブページで公開している。誤りが見つかれば修正していく予定。

<http://www.castle.t.u-tokyo.ac.jp/lecture/>

この講義に関する質問, 要望などは私宛の電子メール (tkondo@castle.t.u-tokyo.ac.jp) でも受け付ける。

1 半導体の光学特性

1.1 光物性の半古典論

光と物質の相互作用について論ずる場合、物質と光をともに古典的に扱う古典論的取扱い、物質は量子論的に扱うものの光は古典的な電磁波とみなす半古典論的取扱い、物質も光も量子論的に議論する量子論的取扱いがある。原子や分子、固体などのマテリアルと光の相互作用を本格的に論じるには半古典論的取り扱いが必要になる。光も量子力学で取り扱う量子論的取扱いが最も厳密だが、その結論のほとんどは半古典論でも導き出すことが可能である。

1.1.1 フェルミの黄金律

定常状態にある系のハミルトニアンを H_0 とし、その固有関数と固有値をそれぞれ ϕ_n, E_n とするとシュレディンガー方程式は

$$H_0\phi_n(\mathbf{r}) = E_n\phi_n(\mathbf{r}) \quad (1.1)$$

で表される。ここに外部から時間に依存した摂動 $H'(t)$ が加わると、系の波動関数 Φ は時間に依存したシュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{r}, t) = (H_0 + H'(t))\Phi(\mathbf{r}, t) \quad (1.2)$$

にしたがって変化する。

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \sum_m a_m(t) \phi_m(\mathbf{r}) e^{-iE_m t/\hbar} \quad (1.3)$$

と展開して式 (1.2) に代入すると次式が得られる。

$$\frac{da_n(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_m a_m(t) H'_{nm} e^{i\omega_{nm}t} \quad (1.4)$$

ここで、

$$H'_{nm} = \int \phi_n^*(\mathbf{r}) H' \phi_m(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \langle n | H' | m \rangle \quad (1.5)$$

は摂動の行列要素、

$$\omega_{nm} = (E_n - E_m)/\hbar \quad (1.6)$$

は振動数単位で表した準位 n, m 間のエネルギー差である。最初に系はエネルギー E_0 の状態にあったとし、 $t = 0$ から摂動が加わったとすると

$$\frac{da_n(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H'_{n0} e^{i\omega_{n0}t} \quad (1.7)$$

となる。摂動 H' が

$$H'(\mathbf{r}, t) = H'_0(\mathbf{r}) (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (1.8)$$

と正弦的に変化する場合には

$$a_n(t) = \frac{\langle n | H'_0 | 0 \rangle}{\hbar} \left[\frac{1 - e^{i(\omega_{n0} + \omega)t}}{\omega_{n0} + \omega} + \frac{1 - e^{i(\omega_{n0} - \omega)t}}{\omega_{n0} - \omega} \right] \quad (1.9)$$

となる。 a_n は $\omega_n = \omega_0 \pm \omega$ の時にのみ大きくなる。第 1 項が光放出に、第 2 項が光吸収に対応している。光吸収について考えて第 2 項のみ残すと、時刻 t での励起状態 $|n\rangle$ の存在確率は

$$|a_n(t)|^2 = \frac{4 |\langle n|H'_0|0\rangle|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2 \frac{\omega_{n0}-\omega}{2} t}{(\omega_{n0} - \omega)^2} \quad (1.10)$$

で与えられる。遷移が起こったといえるくらい十分に長い時間 t では

$$|a_n(t)|^2 = \frac{2\pi}{\hbar^2} t |\langle n|H'_0|0\rangle|^2 \delta(\omega_{n0} - \omega) \quad (1.11)$$

となる（ここで $\frac{1}{\pi} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(xt/2)}{x^2 t/2} = \delta(x)$ の関係を用いた）。したがって、単位時間あたりの遷移確率 W_{n0} は

$$W_{n0} = \frac{d|a_n(t)|^2}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n|H'_0|0\rangle|^2 \delta(E_n - E_0 - \hbar\omega) \quad (1.12)$$

で与えられる。この関係を**フェルミの黄金律 (Fermi's golden rule)** とよぶ。

1.1.2 相互作用ハミルトニアン

いま考えている系の典型的な大きさ（例えば原子の直径）が光の波長に比べて十分に小さいとすると、各電子の感じる電磁場を核の位置での電磁場に等しいと近似することができる。その場合の光と物質の相互作用のハミルトニアンは

$$H' = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E} - \mathbf{m} \cdot \mathbf{B} - \frac{1}{2} \mathbf{Q} \nabla \cdot \mathbf{E} + \dots \quad (1.13)$$

で与えられる。ここで、

$$\mathbf{p} = \int \mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (1.14)$$

は電気双極子モーメント、

$$\mathbf{m} = \frac{1}{2} \int \mathbf{r} \times \mathbf{i}(\mathbf{r}') d\mathbf{r} \quad (1.15)$$

は磁気双極子モーメント、 $\mathbf{Q}$ ($Q_{ij} = \int [r'_i r'_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} r'^2] \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$) は電気四重極子テンソルである。

一般に、右辺の第 2 項と第 3 項は第 1 項と比較してはるかに小さいので、これらを見捨てる近似が通常用いられる。これを**電気双極子近似 (electric-dipole approximation)** とよぶ。

1.1.3 半古典論による誘電率

電気双極子近似のもとでは、 x 方向に振動する単色光電場

$$\mathbf{E}(t) = E_x \cos \omega t \quad (1.16)$$

と電子系との相互作用ハミルトニアンは

$$H' = -(-e\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}(t) = \frac{exE_x}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (1.17)$$

なので、式 (1.12) より、

$$W_{n0} = \frac{\pi E_x^2}{2\hbar} |\mu_{n0}^x|^2 \delta(E_n - E_0 - \hbar\omega) \quad (1.18)$$

となる。ここで、

$$\mu_{n0}^x = \langle n | -ex | 0 \rangle \quad (1.19)$$

を遷移の双極子モーメント (transition dipole moment) とよぶ。位置 x はパリティ奇の演算子なので、原子のように反転対称性がある波動関数のパリティが奇か偶のものに限られる系ではパリティの異なる準位間でしか遷移が起こらないことになる。遷移双極子モーメントがゼロでない遷移を (電気) 双極子許容遷移 (dipole-allowed transition), ゼロとなる遷移を (電気) 双極子禁制遷移 (dipole-forbidden transition) という。式 (1.13) の第 2 項, 第 3 項に起因する磁気双極子遷移, 電気四重極子遷移は電気双極子遷移よりもはるかに小さい。

ここではまず反転対称性のある 2 準位原子 (基底準位を 0, 励起準位を 1 とする) からなる媒質の誘電率を導出してみよう。式 (1.9) より

$$a_1(t) = -\frac{\mu_{10}^x E_x}{2\hbar} \left[\frac{1 - e^{i(\omega_{10} + \omega)t}}{\omega_{10} + \omega} + \frac{1 - e^{i(\omega_{10} - \omega)t}}{\omega_{10} - \omega} \right] \quad (1.20)$$

である。このような系が体積 V 中に N 個あるとすると, 分極 $\mathbf{P} = (N/V)\boldsymbol{\mu}$ の x 成分は

$$P_x(t) = \frac{N}{V} \langle \Phi | -ex | \Phi \rangle = \frac{N|\mu_{10}^x|^2}{\hbar V} \frac{2\omega_{10}}{\omega_{10}^2 - \omega^2} E_x \cos \omega t \quad (1.21)$$

で与えられる。ただし, 遷移がさほど強くなく $a_0(t) = 1$ であると仮定し, また, ω の振動数で振動する項以外は落とした。 $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = \epsilon_r \epsilon_0 \mathbf{E}$ の関係から

$$\epsilon_r = 1 + \frac{N|\mu_{10}^x|^2}{\epsilon_0 \hbar V} \frac{2\omega_{10}}{\omega_{10}^2 - \omega^2} \quad (1.22)$$

が得られる。これを多準位系 (励起状態 j , 基底状態 0) に拡張すると

$$\epsilon_r = 1 + \frac{2N}{3\epsilon_0 \hbar V} \sum_j \frac{\omega_{j0} |\boldsymbol{\mu}_{j0}|^2}{\omega_{j0}^2 - \omega^2} \quad (1.23)$$

となる。ここで, 系が等方的であるとして $|\mu^x|^2$ を $|\boldsymbol{\mu}|^2/3$ で置き換えた。次の式で定義される振動子強度 (oscillator strength)

$$f_j = \frac{2m\omega_{j0}}{3\hbar} |\mathbf{r}_{j0}|^2 \quad (1.24)$$

を用いると式 (1.23) は

$$\epsilon_r = \epsilon_1 = 1 + \sum_j \frac{(Ne^2/m\epsilon_0 V) f_j}{\omega_{j0}^2 - \omega^2} \quad (1.25)$$

と書くことができる。また, 誘電率の虚部は式 (1.25) をクラマース-クローニッヒ変換 (KK 変換)^{*1} することによって次のように得られる。

$$\epsilon_2 = \sum_j \frac{Ne^2}{m\epsilon_0 V} \frac{\pi}{2\omega} f_j [\delta(\omega - \omega_{j0}) + \delta(\omega + \omega_{j0})] \quad (1.26)$$

^{*1} 複素誘電率の実部と虚部の間に成り立つ以下の積分関係式をクラマース-クローニッヒ関係という。

$$\begin{aligned} \epsilon_1(\omega) - 1 &= \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{\omega' \epsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \\ \epsilon_2(\omega) &= -\frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{\omega \epsilon_1(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \end{aligned}$$

これを用いて一方の誘電関数から他方を求める手法を KK 変換という。

1.1.4 寿命とスペクトル幅

自然放出のために励起状態は自ずから緩和していき、その分布は減衰する。励起状態 n が有限の寿命を持ち、その分布が時定数 τ_n で緩和していくとしよう。この効果は、式 (1.4) に次のように緩和の項を付け足すことで取り入れることができる。

$$\frac{da_n(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_m a_m(t) H'_{nm} e^{i\omega_{nm}t} - \frac{\Gamma_n}{2} a_n(t) \quad (1.27)$$

ここで $\Gamma_n = 1/\tau_n$ である。この式から出発して、1.1.3 節と同じ過程を経て誘電率の表式

$$\tilde{\epsilon}_r = 1 + \sum_j \frac{(Ne^2/m\epsilon_0 V) f_j}{\omega_{j0}^2 - \omega^2 + (\Gamma_j/2)^2 - i\Gamma_j \omega} \quad (1.28)$$

が得られる。また、この誘電関数はほぼ $\Delta E = \hbar\Gamma$ のエネルギー幅を持つが、寿命による時間幅 $\Delta t = 1/\Gamma$ との間に不確定性関係 $\Delta E \cdot \Delta t = \hbar$ が成り立っている。不確定性原理によれば、有限の寿命によってエネルギー測定の精度が制限を受け、準位 n のエネルギーは ΔE だけの幅を持つてしまう。これによってスペクトルが広がることになる。

1.1.5 光の吸収と放出

エネルギー E_L と E_U を持つ 2 準位間で遷移について考えよう。光を吸収して L から U へ遷移する確率はフェルミの黄金律 (1.12) より

$$W_{UL} = \frac{\pi}{2\hbar^2} |\mu_{UL}|^2 E_x^2 \delta(\omega_{UL} - \omega) = \frac{\pi |\mu_{UL}|^2}{\epsilon_0 \hbar^2} u_\omega \delta(\omega_{UL} - \omega) \equiv B_{UL} u_{\omega_{UL}} \quad (1.29)$$

と与えられる。ここで、

$$\omega_{UL} = (E_U - E_L)/\hbar \quad (1.30)$$

は振動数単位で表した 2 準位間のエネルギー差、

$$u_\omega = \epsilon_0 |E_x|^2 / 2 \quad (1.31)$$

は光のエネルギー密度である。常識的に予想される通り、吸収に伴う遷移確率は、角振動数 $\omega = \omega_{UL}$ における単位体積あたりの光のエネルギー密度 u_ω に比例している。この式に現れた

$$B_{UL} = \frac{\pi |\mu_{UL}|^2}{\epsilon_0 \hbar^2} \quad (1.32)$$

は**アインシュタインの B 係数**とよばれる。一方、式 (1.9) からわかるように、準位 U から L への遷移して光を放出する確率にも入射光のエネルギー密度 u_ω に比例する部分がある。しかし、それだけでなく、光がまったく存在しない場合にも励起された状態から光子を放出してエネルギーの低い状態に遷移することがあるという経験に照らしてみると、光強度に依存しない遷移過程もあるとしなければならない。前者を**誘導放出 (stimulated emission)**、後者を**自然放出 (spontaneous emission)*2**という。2 準位間の遷移の起こる確率は

$$p(L \rightarrow U) = B_{UL} u_\omega \quad (1.33a)$$

$$p(U \rightarrow L) = B_{LU} u_\omega + A_{LU} \quad (1.33b)$$

*2 自然放出が起こることは、光も量子力学で取り扱う光物性の量子論的取扱いによらなければ示すことができない。

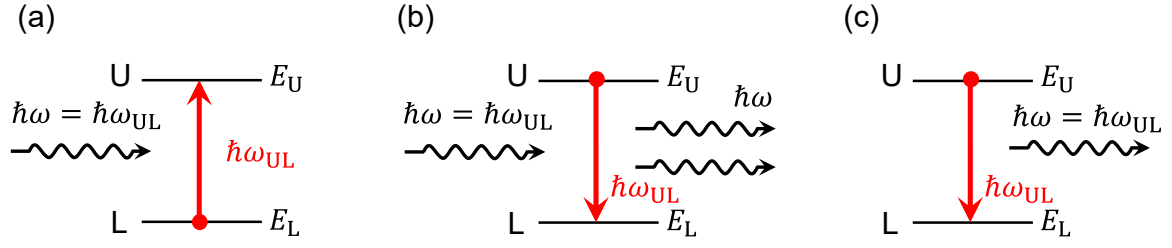


図 1 光吸収 (a) と誘導放出 (b), 自然放出 (c)

で与えられる（自然放出に相当する項を表す A_{nm} を**アインシュタインの A 係数**という）。2 準位系における光吸収と光放出を模式的に図 1 に示した。この 2 準位系に対してプランクの法則とボルツマン分布を適用することによって

$$B_{UL} = B_{LU} = B \quad (1.34a)$$

$$\frac{A_{LU}}{B_{LU}} = \frac{h\omega_{UL}^3}{\pi^2 c^3} \quad (1.34b)$$

という関係が成り立つことを示される。

1.2 半導体のバンド間遷移による光吸収

半導体における光吸収と光放出（発光）には以下の機構が関与する。

- 不純物準位からエネルギーバンド（あるいは、エネルギーバンドから不純物準位）への電子の遷移
- フォノンの生成、消滅
- エネルギーバンド内での電子の遷移（自由キャリア遷移）
- 励起子（exciton）の生成・消滅
- エネルギーバンドから他のエネルギーバンドへの電子の遷移（**バンド間遷移**）

ここでは、半導体や絶縁体で特に重要な、価電子帯と伝導帯の間でのバンド間遷移について考える。

結晶中の価電子帯と伝導帯の電子の波動関数は、それぞれ**ブロッホ (Bloch) 関数**

$$\psi_v = u_k^v(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}_v \cdot \mathbf{r}) \quad (1.35a)$$

$$\psi_c = u_k^c(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}_c \cdot \mathbf{r}) \quad (1.35b)$$

で与えられる（**ブロッホの定理**）。ここで、 u_k は結晶格子と同じ周期性を持つ関数で、

$$u_k(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = u_k(\mathbf{r}) \quad (1.36)$$

を満たす。ここに現れた $\mathbf{k}_{c,v}$ に $\hbar$ をかけた $\hbar\mathbf{k}_{c,v}$ は**結晶運動量**とよばれる。この結晶に角振動数 ω 、波数ベクトル $\mathbf{k}$ の直線偏光（電場振動方向を x とする）単色平面波

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \mathbf{e}_x E_x \exp(i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)) \quad (1.37)$$

が入射したときの、価電子帯から伝導帯への遷移確率はフェルミの黄金律 (1.12) より

$$W_{cv} = \frac{\pi E_x^2}{2\hbar} e^2 \left| \langle \psi_c | x \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) | \psi_v \rangle \right|^2 \delta(E_c - E_v - \hbar\omega) \quad (1.38)$$

となる。 u_k の周期性から、遷移の行列要素の積分は単位胞内の積分の足しあわせに書き直すことができる。すなわち、 $\mathbf{r} = \mathbf{R}_n + \mathbf{r}'$ ($\mathbf{r}'$ は単位胞内の座標) を導入すると、

$$\begin{aligned}\langle \psi_c | x \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) | \psi_v \rangle &= \int u_k^{c*} x u_k^v \exp[i(\mathbf{k}_v - \mathbf{k}_c + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}] d\mathbf{r} \\ &= \int_{\text{単位胞}} u_k^{c*} x' u_k^v d\mathbf{r}' \times \sum_n \exp[i(\mathbf{k}_v - \mathbf{k}_c + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_n]\end{aligned}\quad (1.39)$$

となる。これは $\mathbf{k}_v - \mathbf{k}_c + \mathbf{k} = 0$ すなわち

$$\mathbf{k}_c - \mathbf{k}_v = \mathbf{k} \quad (1.40)$$

の時にのみ 0 でなくなる。これは運動量保存則にほかならない。光の波長は単位胞の大きさに比べてはるかに長いので、 $\mathbf{k}$ は第 1 ブリュアンゾーンの大きさに比べて無視できるほど小さい。したがって式 (1.40) は

$$\mathbf{k}_c = \mathbf{k}_v \quad (1.41)$$

とみなせる。すなわち、電子の遷移はほぼ同じ結晶運動量 $\hbar\mathbf{k}$ で垂直に起こる。これを**直接遷移 (direct transition)** あるいは**垂直遷移 (vertical transition)** という。

実際の吸収係数を求めるには、単に二つのブロッホ状態間の遷移だけでなく、エネルギー保存則と運動量保存則を満たす状態すべてについて和をとる必要がある。逆格子空間 ($\mathbf{k}$ 空間) で単位体積あたりの状態密度は $2/(2\pi)^3$ であるからこれをかけたうえで許容される $\mathbf{k}$ のすべての値に対して積分すればよい。吸収係数は最終的に

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{\omega e^2}{6\epsilon_0 c} |\mathbf{r}_{cv}|^2 J_{cv}(\hbar\omega) \quad (1.42)$$

で与えられる。

$$J_{cv}(\hbar\omega) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}) - \hbar\omega) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int \delta(E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}) - \hbar\omega) d^3\mathbf{k} \quad (1.43)$$

は**結合状態密度 (joint density of state)** とよばれる。

まず、最も簡単な例として、価電子帯の上端と伝導帯の下端とがともに $\mathbf{k} = 0$ (Γ 点) にあり、バンドがともに放物線的でかつ球対称 (等方的) な場合について考えよう。この場合は

$$E_c(\mathbf{k}) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \quad (1.44a)$$

$$E_v(\mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} \quad (1.44b)$$

と書ける。ここで、 m_e は伝導帯電子の**有効質量 (effective mass)**、 m_h は価電子帯正孔の有効質量である。すると、

$$E_c - E_v = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \quad (1.45)$$

となる。ここで、 μ は**換算質量 (reduced mass)** とよばれる

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \quad (1.46)$$

である。したがって、

$$\begin{aligned}
 J_{cv}(\hbar\omega) &= \frac{2}{(2\pi)^3} \int \delta(E_c - E_v - \hbar\omega) 4\pi k^2 dk \\
 &= \frac{1}{\pi^2} \int \delta(E_{cv} - \hbar\omega) \frac{2\mu}{\hbar^2} (E_{cv} - E_g) \left(\frac{dE_{cv}}{dk} \right)^{-1} dE_{cv} \\
 &= \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\hbar\omega - E_g}
 \end{aligned} \tag{1.47}$$

となる。ここで $E_{cv} = E_c - E_v$ である。第 2 行から第 3 行への変形で $\frac{dE_{cv}}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{\mu} = \hbar \sqrt{\frac{2}{\mu}} (E_{cv} - E_g)$ を用いた。すなわち、直接遷移型の（3 次元）半導体のバンド間遷移の吸収スペクトルはほぼ $\sqrt{\hbar\omega - E_g}$ に比例する。この吸収スペクトルはバンドギャップエネルギー E_g から始まるが、吸収スペクトルのこの低エネルギー側の端を**吸収端 (absorption edge)** とよぶ。

一方、フォノンの吸収・放出をとまなうならば、 $\mathbf{k}_c \neq \mathbf{k}_v$ の状態間での遷移が可能である。この場合には

$$E_c(\mathbf{k}_c) - E_v(\mathbf{k}_v) = \hbar\omega \pm \hbar\omega_p \tag{1.48a}$$

$$\hbar\mathbf{k}_c - \hbar\mathbf{k}_v = \hbar\mathbf{k} \pm \hbar\mathbf{k}_p \tag{1.48b}$$

と保存則が満たされる。ここで、 $\omega_p, \mathbf{k}_p$ はフォノンの角振動数、波数ベクトルである。このような遷移を**間接遷移 (indirect transition)** という。間接遷移に対する吸収スペクトルは

$$\alpha = \frac{A(\hbar\omega + \hbar\omega_p - E_g)^2}{e^{\hbar\omega_p/kT} - 1} + \frac{A(\hbar\omega - \hbar\omega_p - E_g)^2}{1 - e^{-\hbar\omega_p/kT}} \tag{1.49}$$

となる。第 1 項はフォノンの吸収を、第 2 項はフォノンの放出を伴う遷移にそれぞれ対応する。

価電子帯の上端と伝導帯の下端とがともに同じ $\mathbf{k}$ のところにある場合を直接型のバンドギャップ、異なる $\mathbf{k}$ にある場合を間接型のバンドギャップとよぶ。また、直接型のバンドギャップを持つ半導体を**直接遷移型半導体**あるいは**直接半導体 (direct semiconductor)**、間接型のバンドギャップを持つ半導体を**間接遷移型半導体**あるいは**間接半導体 (indirect semiconductor)** という。GaAs, InP, GaN, ZnSe などが代表的な直接遷移型半導体、Si, Ge, AlAs などが間接遷移型半導体である。間接半導体である Ge と直接半導体の GaAs, ZnSe のバンド構造を図 2 に示す。

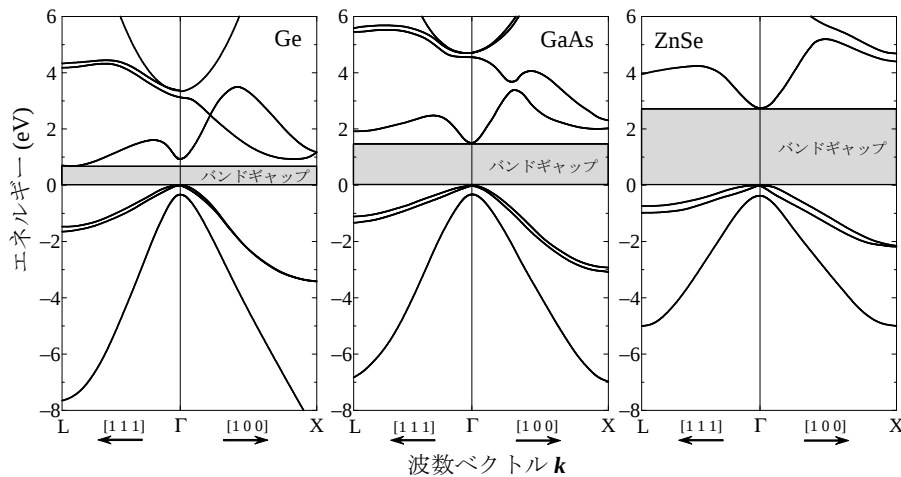


図 2 Ge, GaAs, ZnSe のバンド構造

1.3 半導体のバンド間遷移による発光

ここまで考えてきたのは、価電子帯から伝導帯への電子の励起（電子・正孔対の生成）による光吸収であった。この逆過程である、励起された伝導帯電子の価電子帯への緩和（電子・正孔再結合）による光放出（発光）についてここから議論しよう。

1.3.1 熱平衡状態での電子・正孔再結合

電子・正孔再結合の起きる確率（再結合率）は、一般に

$$G = Rnp \quad (1.50)$$

で与えられる。ここで、 n, p はそれぞれ電子密度、正孔密度であり、 R は再結合率と呼ばれるパラメータである。熱平衡状態の半導体では、質量作用の法則

$$np = n_i^2 = 4 \left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^3 (m_e m_h)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right) \quad (1.51)$$

が成り立つ（ここで、 n_i は真性キャリア密度）ので、式 (1.50) の値は不純物添加の有無によらず一定である。たとえば、GaAs の場合、 $n_i = 1.8 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$ 、 $R \approx 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{s}$ なので、 $G \approx 300 \text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$ である。厚さ $1 \mu\text{m}$ の GaAs 薄膜を考えると、得られる光子数はたかだか $0.03 \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ に過ぎず、実用的な発光源とはなりえない。そこで、なんらかの方法で電子・正孔対を過剰に生成する外部励起が必要となる。

1.3.2 内部量子効率

電子・正孔再結合には、電子・正孔対のエネルギーが光子に変換される**発光性再結合 (radiative recombination)** と、発光を伴わない**非発光性再結合 (nonradiative recombination)** とがある。外部からの励起によって生じた過剰電子密度 Δn （これは電子・正孔対密度に等しい）は、励起のない状態では以下のレート方程式に従って熱平衡状態（ $\Delta n = 0$ ）へ緩和する。

$$\frac{d(\Delta n)}{dt} = -\frac{\Delta n}{\tau_r} - \frac{\Delta n}{\tau_{nr}} = -\frac{\Delta n}{\tau} \quad (1.52)$$

ここで、 τ_r は電子・正孔の発光性再結合寿命、 τ_{nr} は電子・正孔の非発光性再結合寿命であり、

$$\tau = \left(\tau_r^{-1} + \tau_{nr}^{-1} \right)^{-1} \quad (1.53)$$

は電子・正孔の再結合寿命である。過剰電子密度は熱平衡状態へ

$$\Delta n(t) = \Delta n(t_0) \exp\{-(t - t_0)/\tau\} \quad (1.54)$$

のように時定数 τ で指数関数的に緩和する。

全再結合率に対する発光性再結合率の比を**内部量子効率 (internal quantum efficiency)** という。再結合率は再結合寿命の逆数で与えられるので、内部量子効率は

$$\eta_i = \frac{\tau_r^{-1}}{\tau^{-1}} = \frac{\tau_{nr}}{\tau_r + \tau_{nr}} \quad (1.55)$$

となる。間接遷移型半導体である Si の電子・正孔再結合寿命は、室温で $\tau_r \approx 10 \text{ ms}$ 、 $\tau_{nr} \approx 100 \text{ ns}$ 、 $\tau \approx 100 \text{ ns}$ であり、内部量子効率は 10^{-5} にしかない。これに対して、直接遷移型半導体である GaAs の典型的な再結合寿命は、室温で $\tau_r \approx 100 \text{ ns}$ 、 $\tau_{nr} \approx 100 \text{ ns}$ 、 $\tau \approx 50 \text{ ns}$ 程度であり、内部量子効率は 0.5 となる。質の良い GaAs 結晶では $\tau_{nr} \gg \tau_r$ とすることができ、 $\eta_i \approx 1$ が実現できる。

1.3.3 電子・正孔の注入による発光

励起（そのレートを R とする）によって過剰な電子・正孔対が生成する場合を考えよう。この場合のレート方程式は

$$\frac{d(\Delta n)}{dt} = R - \frac{\Delta n}{\tau} \quad (1.56)$$

で与えられる。定常状態では,

$$\Delta n = R\tau \quad (1.57)$$

となる。すなわち, 過剰電子・正孔対密度は励起レートに比例する。また, 電子・正孔再結合によって光子が発生する率は

$$\eta_i R = \eta_i \frac{\Delta n}{\tau} = \frac{\Delta n}{\tau_r} \quad (1.58)$$

となる。例えば, GaAs に $\Delta n = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ の過剰電子・正孔対を注入できれば, $\Delta n/\tau_r \simeq 10^{24} \text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$ の光子を発生させられる。GaAs のバンドギャップエネルギー $E_g = 1.42 \text{ eV}$ に対応するエネルギーの光子の場合, これは $2.3 \times 10^5 \text{ W/cm}^3$ の光パワー密度に相当する。厚さ $1 \mu\text{m}$, 面積 $100 \times 100 \mu\text{m}^2$ の素子から得られる光パワーは 2.3 mW であり, これは十分に実用的である。

2 化合物半導体

2.1 化合物半導体とは

Si や Ge のように 1 種類の元素からなる半導体を元素半導体とよぶのに対し, GaAs や ZnSe のように 2 種類以上の元素から構成される化合物が半導体となった場合, これを**化合物半導体 (compound semiconductor)**という。実用上重要な化合物半導体のほとんどが, Si と同じ正四面体的な 4 配位構造を持つ。この 4 配位構造は sp^3 混成軌道によって形成されるので, 必然的に, こうした化合物半導体は, IV 族と IV 族, あるいは III 族と V 族, II 族と VI 族などの元素の組み合わせで実現されることになる。SiC が **IV-IV 族化合物半導体**の, GaAs や InP, GaN が **III-V 族化合物半導体**の, ZnO や CdS が **II-VI 族化合物半導体**の典型例である。

化合物半導体は, 高い電子移動度, 直接遷移による高い発光効率, 紫外から赤外域に及ぶ広い範囲のバンドギャップなどの際だった特徴があり, 高電子移動度トランジスタ (HEMT) などの高速電子デバイスや, 発光ダイオード, 半導体レーザー, 受光デバイスなどの光デバイスの材料として広く実用に供せられている。以下に, 化合物半導体の (Si と対比した) 特徴をまとめる。

- 高い電子移動度を有するものが多い。
- 直接遷移型のエネルギーバンド構造を有するものが多い。
- 複数の化合物半導体を固溶させた混晶半導体が自由に作製できる。
- 混晶も含めて適切な材料を選択することにより, 格子定数やバンドギャップを広い範囲で連続的に調整できる。
- ヘテロエピタキシー^{*3}技術を用いて, 高品質な単結晶薄膜をきわめて高い精度で (サブ原子層厚から数十ミクロン以上に及ぶ広い膜厚範囲で) 作製できる。
- 高品質なヘテロエピタキシャル薄膜の界面に形成される良質なヘテロ接合を利用できる。

2.2 化合物半導体の結晶構造

III-V 族, II-VI 族化合物半導体の多くは, 立方晶で点群 $\bar{4}3m$ (T_d) に属する**閃亜鉛鉱 (zincblende) 型**, あるいは六方晶で点群 $6mm$ (C_{6v}) に属する**ウルツ鉱 (wurtzite) 型**の結晶構造を有する。^{*4}どちらも, ダイヤモンド構造^{*5}と同様, sp^3 混成軌道の結合からなる正四面体的 4 配位構造を基本骨格としている。閃亜鉛鉱構造は, 図 3(a) に示すように, A 原子の作る面心立方 (立方最密) 格子 (これを副格子とよぶ) に B 原子の作る面心立方格子を体対角線方向 [111] に $a/4$ だけずらして重ね合わせた構造である。III-V 族化合物半導体の場合, 一方の副格子 (たとえば A サイト) が III 族原子に占有され, もう一方の副格子 (B サイト) が V 族原子に占有される。これに対して, ウルツ鉱構造は, A 原子の作る六方最密格子に B 原子の作る六方最密格子を c 軸方向 [0001] に約 $3c/8$ だけずらして

^{*3} 基板と異なる材料がエピタキシャル成長する現象をヘテロエピタキシーという。「ヘテロ (hetero)」は「異なる」を意味するギリシャ語である。これに対して, 基板と同じ材料がエピタキシャル成長する場合をホモ (homo) エピタキシーとよぶ。

^{*4} SiC などは, これ以外に六方晶系の 4H や 6H, 菱面体晶の 12R などの結晶構造を持つものも存在する。いずれの結晶構造も正四面体的 4 配位構造を基本としており, これらは閃亜鉛鉱的構造とウルツ鉱的構造の組み合わせであるとみなせる。

^{*5} ダイヤモンド構造の点群は $m3m$ (O_h) である。

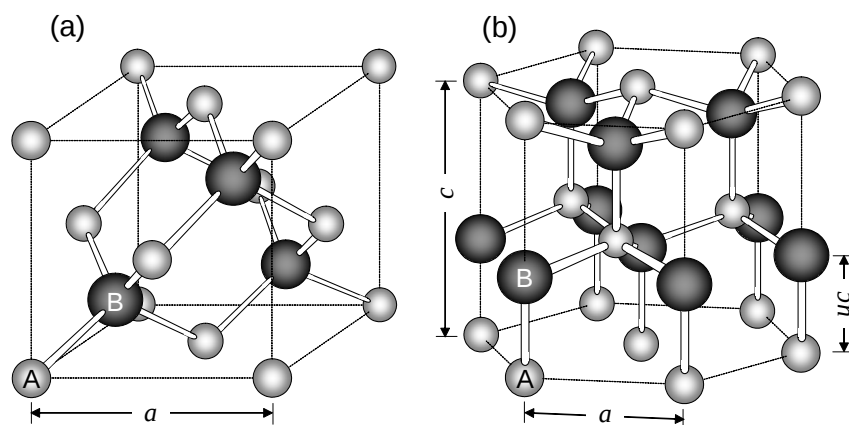


図3 閃亜鉛鉱型結晶 (a) とウルツ鉱型結晶 (b) の結晶構造

表1 ダイヤモンド型、閃亜鉛鉱型、ウルツ鉱型結晶の結晶学的な特徴

結晶構造	晶形	極性軸 ^a	反転対称性	自発分極	誘電性	光学的異方性
ダイヤモンド構造	立方晶	—	あり	なし	常誘電性	等方的
閃亜鉛鉱構造	立方晶	$\langle 111 \rangle$	なし	なし	圧電性	等方的
ウルツ鉱構造	六方晶	$[0001]$	なし	あり ($\parallel [0001]$)	焦電性	一軸性

^a それ自身に垂直な鏡映面を持たない n 回対称軸

重ね合わせた構造である (図3(b))。

ダイヤモンド構造、閃亜鉛鉱構造、ウルツ鉱構造の結晶学的な特徴を表1にまとめた。化合物半導体結晶中の結合はすべて異種原子間の極性結合であり、この点が同種原子間の結合しか持たないダイヤモンド型結晶と決定的に異なる点である。そのため、ダイヤモンド構造は対称中心があるのに対して、閃亜鉛鉱構造とウルツ鉱構造は反転対称性を欠いている。閃亜鉛鉱構造では4配位構造は完全な正四面体構造を保ち、その対称性から4本の結合の極性が互いに打ち消しあい、巨視的には自発分極を持たない。これに対して、ウルツ鉱構造は若干事情が複雑である。 $c/a = \sqrt{8/3} = 1.633$ かつ $u = 3/8 = 0.375$ (u は c 軸に平行な AB 間結合距離と c の比) の場合 (これを理想的なウルツ鉱構造という) に限って自発分極を持たないが、一般的なウルツ鉱構造の結晶はこの理想構造から歪んでおり、 $[0001]$ 方向の自発分極を有する。

2.3 化合物半導体の電子構造

Si や Ge が間接遷移型のエネルギーバンド構造を取るのに対して、化合物半導体の多くが直接遷移型のバンド構造を有するという点が、化合物半導体の最大の強みである。図2に Ge と GaAs, ZnSe のエネルギーバンド構造を示した。これらはいずれも周期表第4周期の元素から構成された半導体結晶である。Ge は、価電子帯の上端が Γ 点 ($k = 0$, すなわちブリルアンゾーンの原点) に、伝導帯の下端が L 点の近く ($k \parallel [111]$ の方向) にある間接遷移型である。これに対して、GaAs や ZnSe, GaN は、価電子帯上端と伝導帯下端とがともに同じ $k = 0$ の Γ 点にある直接型バンドギャップを有する。

化合物半導体は多くが直接半導体であるが、すべてが直接半導体であるわけではない。III-V 族化合物半導体では、AlN, GaN, InN, InP, GaAs, InAs, GaSb, InSb が直接半導体となるのに対して、AlP, GaP, AlAs, AlSb は間接半導体である。II-VI 族化合物半導体は、ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe,

CdS, CdSe, CdTe, HgTe などがすべて直接半導体である。また、IV-IV 族化合物半導体の SiC はすべての結晶形が間接半導体とされている。

なお、図 2 からわかるとおり、 $\text{Ge} \rightarrow \text{GaAs} \rightarrow \text{ZnSe}$ となるにつれ、イオン結合性が大きくなるのに伴ってバンドギャップエネルギーが大きくなっていく。これは、この順に隣接原子間の波動関数の重なりが小さくなってバンド幅が小さくなることに起因しており、半導体全般に見られる傾向である。

化合物半導体では、構成原子が sp^3 混成軌道による正四面体的結合を形成するが、伝導帯の底付近は s 軌道的、価電子帯の頂上付近は p 軌道的な性格を持つ。閃亜鉛鉱型半導体の場合、p 軌道的性格を有する価電子帯は全角運動量を用いて分類される以下の 3 つのバンドから構成される。

重い正孔 (heavy hole) (Γ_8)

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iY)\alpha \quad (2.1a)$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(X - iY)\beta \quad (2.1b)$$

軽い正孔 (light hole) (Γ_8)

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{6}}[(X + iY)\beta - 2Z\alpha] \quad (2.2a)$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}[(X - iY)\alpha + 2Z\beta] \quad (2.2b)$$

スピン軌道分裂バンド (spin-orbit split-off band) (Γ_7)

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}[(X + iY)\beta + Z\alpha] \quad (2.3a)$$

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{3}}[-(X - iY)\alpha + Z\beta] \quad (2.3b)$$

ここで、 $|j, m_j\rangle$ の j と m_j はそれぞれ全角運動量とその z 成分の固有値を与える量子数 (j^2 の固有値は $j(j+1)$, j_z の固有値は m_j) である。重い正孔と軽い正孔は Γ 点 ($\mathbf{k} = 0$) で縮退し、スピン軌道分裂バンドはスピン軌道相互作用によって分裂している。そのエネルギー差は GaAs の場合で $\Delta_{\text{so}} = 0.34$ eV, InP で $\Delta_{\text{so}} = 0.11$ eV である ($\Delta_{\text{so}} > 0$ はスプリットオフバンドが下にあることを示す)。一方、伝導帯はスピン以外の縮退はなく、

電子 (electron) (Γ_6)

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{\text{cb}} = S\alpha \quad (2.4a)$$

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{\text{cb}} = S\beta \quad (2.4b)$$

となっている。電子 (Γ_6 バンド) とスプリットオフ正孔 (Γ_7 バンド) は分散が球対称で、その有効質量は方向によらず一定となる。GaAs では $m_{\text{e}}^* = 0.067m_0$, $m_{\text{so}}^* = 0.15m_0$ (m_0 は電子の静止質量) である。それに対して、重い正孔と軽い正孔 (Γ_8 バンド) は立方対称で、方位によって有効質量が異なる。 $\mathbf{k} \parallel (100)$ では

$$m_{\text{hh}} = (\gamma_1 - 2\gamma_2)^{-1}m_0 \quad (2.5a)$$

$$m_{\text{lh}} = (\gamma_1 + 2\gamma_2)^{-1}m_0 \quad (2.5b)$$

$\mathbf{k} \parallel (111)$ では

$$m_{hh} = (\gamma_1 - 2\gamma_3)^{-1}m_0 \quad (2.6a)$$

$$m_{lh} = (\gamma_1 + 2\gamma_3)^{-1}m_0 \quad (2.6b)$$

で与えられる。ここで、 $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ は Luttinger パラメータとよばれる量で、GaAs の場合、 $\gamma_1 = 6.85$, $\gamma_2 = 2.10$, $\gamma_3 = 2.90$ (したがって、 $\mathbf{k} \parallel (100)$ で $m_{hh} = 0.38m_0$, $m_{lh} = 0.090m_0$, $\mathbf{k} \parallel (111)$ で $m_{hh} = 0.95m_0$, $m_{lh} = 0.079m_0$) とされている。

ウルツ鉱構造では、価電子帯の正孔のバンドの性質が異なってくる。

重い正孔 (heavy hole) (Γ_9)

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iY)\alpha \quad (2.7a)$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(X - iY)\beta \quad (2.7b)$$

軽い正孔 (light hole) (Γ_7)

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iY)\beta \quad (2.8a)$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(X - iY)\alpha \quad (2.8b)$$

結晶場分裂バンド (crystal-field split-off band) (Γ_7)

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = Z\alpha \quad (2.9a)$$

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = Z\beta \quad (2.9b)$$

重い正孔と軽い正孔はスピン軌道相互作用によって分裂し、その分裂幅は GaN の場合 $\Delta_{so} = 16$ meV, 軽い正孔と結晶場分裂正孔は結晶場によって分裂しており、分裂幅は GaN で $\Delta_{cr} = 21$ meV である。窒化物半導体の電子・正孔の有効質量は閃亜鉛鉱構造半導体のそれらと比較して大きい。GaN の場合、 $\mathbf{k} \parallel [0001]$ に対して $m_e = 0.20m_0$, $m_{hh} = 1.76m_0$, $m_{lh} = 1.76m_0$, $m_{ch} = 0.16m_0$, $\mathbf{k} \perp [0001]$ に対して $m_e = 0.23m_0$, $m_{hh} = 1.61m_0$, $m_{lh} = 0.14m_0$, $m_{ch} = 1.04m_0$ とされている。

2.4 化合物半導体混晶

化合物半導体は、異なる半導体を任意の組成比で固溶させた**半導体混晶 (semiconductor alloy)** を容易に作製できる。これは、化合物半導体の最も重要な特徴の一つである。III-V 族化合物半導体の場合を例にとると、以下のような半導体混晶が利用可能である。

- **3 元混晶:** $A_x^{III}B_{1-x}^{III}D^V$, $A_x^{III}D_x^VE_{1-x}^V$
- **4 元混晶:** $A_x^{III}B_{1-x}^{III}D_y^VE_{1-y}^V$, $A_x^{III}B_y^{III}C_{1-x-y}^{III}D^V$, $A_x^{III}D_x^VE_y^VF_{1-x-y}^V$

混晶の組成を変えることで、バンドギャップエネルギー、格子定数、有効質量、誘電率、屈折率などの物性値を連続的に（かつ、ほとんどの場合単調に）変化させることができる。化合物半導体はヘテロエピタキシー技術によって高品質なヘテロ接合を作製できることとあいまって、化合物半導体を用いて極めて高い自由度で多彩な機能を持ったデバイスが実現できるようになる。その意味で、化合

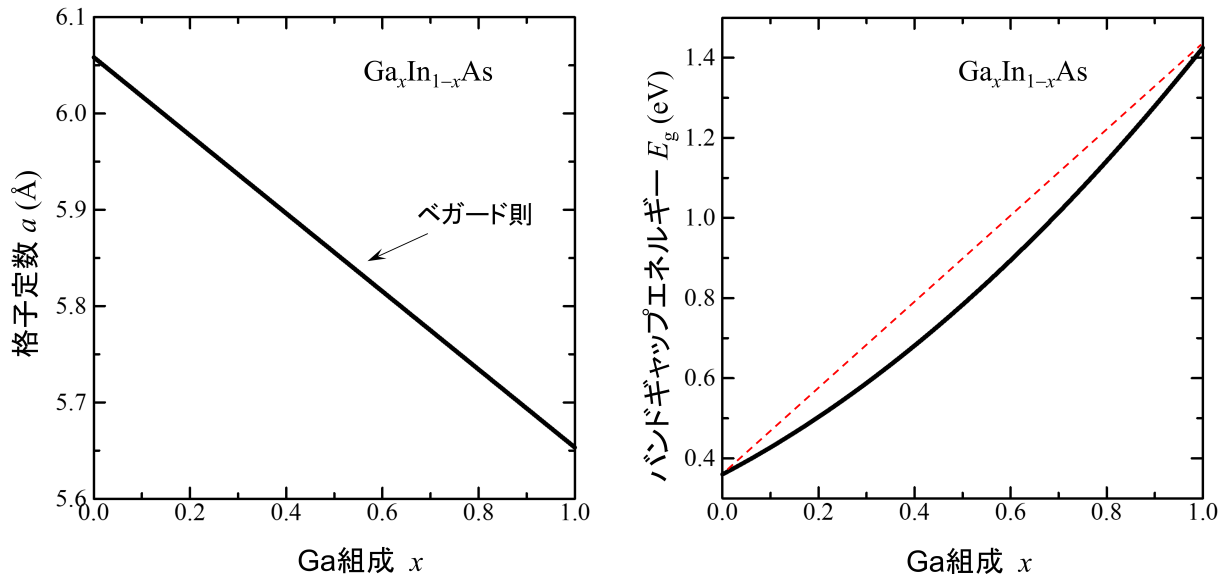


図4 3元混晶半導体 $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ の格子定数 (a) とバンドギャップエネルギー (b) の Ga 組成 x 依存性。

物半導体は高い自由度で設計可能な、エンジニアリング可能な材料といえることができる。特に、バンドギャップエネルギーは発光デバイスの発光波長を決定すると同時に、ヘテロ構造におけるバンドオフセット^{*6}に直接関わる重要な物性値である。化合物の組み合わせの選択と混晶半導体の組成制御によって、広い範囲で連続的にバンドギャップエネルギーをコントロールできるというのは極めて重要な特徴である。この点に着目して材料・デバイスの設計をおこなう手法のことを**バンドギャップエンジニアリング (bandgap engineering)** という。^{*7}

図4に代表的な3元混晶半導体である $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ の格子定数とバンドギャップエネルギーの Ga 組成 x 組成依存性をしめす。格子定数とバンドギャップエネルギーはともに組成に対して連続的に変化している。格子定数の Ga 組成 x に対する依存性は以下のようにほぼ線形と見なせる。

$$a(\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}) = x a(\text{GaAs}) + (1 - x) a(\text{InAs}) \quad (2.10)$$

このように混晶の物性値が組成比に対して線形に変化する性質を**ベガード則 (Vegard's rule)** とよぶ。ほとんどの混晶半導体での格子定数でベガード則がほぼ成り立つものとされている。一方、バンドギャップエネルギーは、どの混晶半導体でも組成に対する線形関係からかなり外れる。このような線形関係からのずれを**ボウイング (bowing)** という。多くの3元混晶のバンドギャップエネルギーは、以下のように組成に対する2次式で近似できる。

$$E_g(\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}) = x E_g(\text{GaAs}) + (1 - x) E_g(\text{InAs}) + Bx(1 - x) \quad (2.11)$$

ここで、ベガード則からのずれを表す項の係数 B はボウイングパラメータとよばれる。

このように、バンドギャップエネルギーを含めた様々な物性値をかなり自由に混晶組成によってコントロールできる点は極めて重要である。ただし、ほとんどの化合物半導体デバイスがヘテロエピタ

^{*6} ヘテロ接合をはさむ二つの異種材料のバンドギャップエネルギーとフェルミエネルギーの違いのためにヘテロ接合界面に生じる価電子帯・伝導帯エネルギーの不連続な飛びそのもの、あるいはそこでのエネルギー差をバンドオフセットという。

^{*7} バンドギャップエネルギーだけでなく他の物性値もバンド構造の変化から制御しようという、より広義の手法をバンドエンジニアリングとよぶことがある。

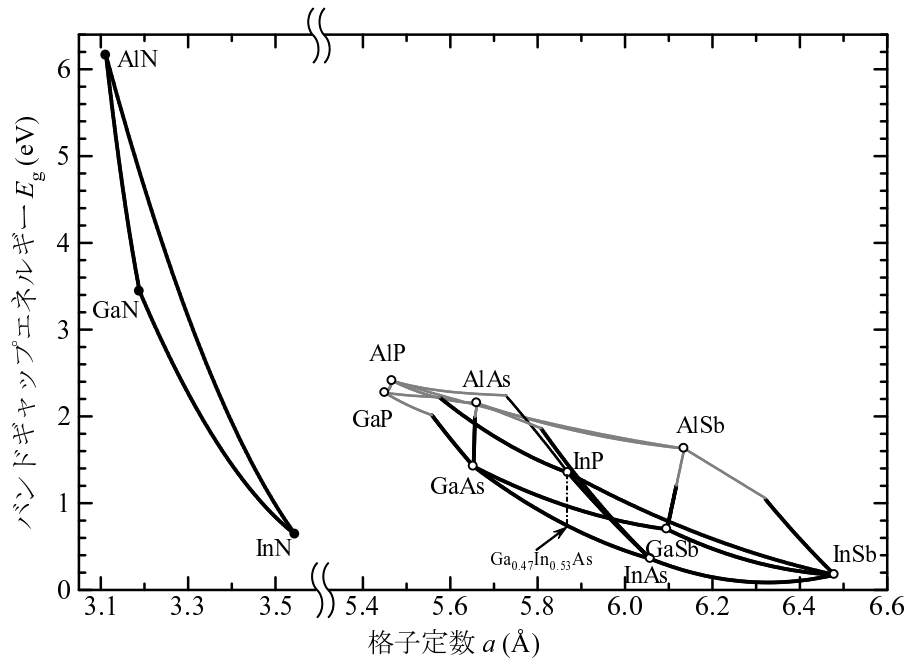


図5 III-V族化合物半導体の格子定数とバンドギャップエネルギーの関係。黒丸はウルツ鉱型結晶，白丸は閃亜鉛鉱型結晶のものである。元化合物を結ぶ線が3元混晶を表し，それに囲まれた領域が4元混晶を表す。黒の実線は直接遷移型，灰色の実線は間接遷移型ギャップであることをしめす。

キシーによって作製されるという事実から，格子定数に関する強い制限が加わることに注意しなければならない。大型で良質な単結晶基板が入手できる化合物半導体は，GaAs，InPなどに限られる。良質なヘテロエピタキシーは下地結晶とほぼ同じ格子定数を有する材料でしか実現できないので，バンドギャップエンジニアリングは，閃亜鉛鉱構造結晶の場合，GaAsやInPと格子整合する組成の範囲内でおこなわなければいけない。代表的なIII-V族化合物半導体の格子定数とバンドギャップエネルギーの関係をしめたのが図5である。GaAsやInPといった基板結晶と格子整合し，かつ所望のバンドギャップを有する直接遷移型の化合物半導体をこの図から選択する必要がある。格子定数とバンドギャップはともに組成の関数なので，パラメータが1つしかない3元混晶では，一般に，格子整合系で望みのバンドギャップを得ることはできない。^{*8}これに対して，4元混晶では格子整合系においてもバンドギャップをある程度自由に制御することが可能である。

2.5 化合物半導体薄膜の作製法

化合物半導体薄膜の用途の大部分は高品質の単結晶エピタキシャル膜を必要とする。代表的なヘテロエピタキシャル成長技術のほとんどは化合物半導体薄膜の作製のために開発されてきたといつてよい。最も早く実用化された半導体発光デバイスであるLEDや初期のAlGaAsレーザはすべて**液相エピタキシー (LPE) 法**によって作製された。比較的簡便で安価な装置を用いて高品質のヘテロエピタキシャル薄膜の成長が可能であることから，LPEは現在でも一部のLED作製に用いられている。現在，化合物半導体薄膜の作製法として最も広く用いられているのは**気相エピタキシー (VPE) 法**で

^{*8} 実は上で例としてあげたAlGaAsは例外的な材料である。AlAsとGaAsの格子不整合は0.12%と小さく，そのため，3元混晶半導体 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ は全組成領域にわたってGaAsに“ほぼ”格子整合する。

ある。その中でも、有機金属原料を用いる**有機金属気相エピタキシー (MOVPE あるいは MOCVD) 法**、塩化物原料を用いるクロライド VPE 法、水素化物原料を用いるハイドライド VPE 法は実用デバイスの量産に広く利用されている。大面積基板上に成長でき量産性に優れること、ガス原料を用いているために組成制御性に優れ多元混晶の成長に適していることなどがその特徴である。**分子線エピタキシー (MBE) 法**は、気相法よりもはるかに急峻なヘテロ界面が形成できることから、量子カスケードレーザなど、精密なサイズ制御が要求される素子の作製に用いられている。

3 半導体発光デバイス

3.1 発光ダイオード

半導体 pn 接合を順バイアスして電流注入によって電子・正孔対を生成し、電子・正孔再結合による自然放出光を取り出すデバイスが発光ダイオード (LED: light-emitting diode) である。

3.1.1 電流注入時のキャリア濃度

3 次元の直接遷移型半導体の伝導帯と価電子帯の状態密度関数 $\rho_c(E), \rho_v(E)$ は、それぞれ、

$$\rho_c(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - E_c} \quad (3.1a)$$

$$\rho_v(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_h}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E_v - E} \quad (3.1b)$$

で与えられる。ここで、 m_e, m_h は電子と正孔の有効質量、 E_c, E_v はそれぞれ、伝導帯の最少エネルギー、価電子帯の最大エネルギーで、バンドギャップエネルギーは $E_g = E_c - E_v$ である。熱平衡状態では、エネルギー E の状態を電子が占める確率は、一つのパラメータ E_F (**フェルミ準位 (Fermi level)** あるいは**フェルミエネルギー (Fermi energy)**) で特徴づけられるフェルミ・ディラック分布関数

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1} \quad (3.2)$$

で与えられるが、電流注入されている場合にはこれは成り立たない。一般に、励起されたキャリアのバンド内緩和時間 (~ 0.1 ps) はバンド間遷移 (電子・正孔再結合) 時間 ($\sim$ ns) よりもはるかに短いので、電流注入によって励起された電子と正孔はそれぞれ伝導帯と価電子帯内で独立にフェルミ・ディラック分布すると考えてよい。このような**準熱平衡状態**では、電子の分布 $f_c(E), f_v(E)$ は、伝導帯と価電子帯でそれぞれ、

$$f_c(E_2) = \frac{1}{e^{(E_2-E_F^c)/k_B T} + 1} \quad (3.3a)$$

$$f_v(E_1) = \frac{1}{e^{(E_1-E_F^v)/k_B T} + 1} \quad (3.3b)$$

で与えられることになる。ここで、 E_F^c と E_F^v はそれぞれ電子と正孔の**擬フェルミ準位 (quasi Fermi level)** である。電子密度と正孔密度は

$$n = n_0 + \Delta n = \int_{E_c}^{\infty} \rho_c(E) f_c(E) dE \quad (3.4a)$$

$$p = p_0 + \Delta n = \int_{-\infty}^{E_v} \rho_v(E) \{1 - f_v(E)\} dE \quad (3.4b)$$

で与えられる。ここで、 n_0 と p_0 は電流注入がない時 (熱平衡状態) の電子密度と正孔密度である。注入を強めれば、 E_F^c (E_F^v) は E_F から単調に増加 (減少) し、 n (p) が増加する。絶対零度 ($T = 0$ K) では

$$E_F^c = E_c + (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m_e} (\Delta n)^{2/3} \quad (3.5a)$$

$$E_F^v = E_v - (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m_h} (\Delta n)^{2/3} \quad (3.5b)$$

の関係が成り立つ。

3.1.2 電流注入時の自然放出スペクトル

エネルギー E_2 ($> E_c$) の電子とエネルギー E_1 ($< E_v$) の正孔が再結合して自然放出光を放射するためには、伝導帯のエネルギー E_1 の状態が電子で占有され、かつ価電子帯のエネルギー E_2 の状態が空（占有されていない）でなければならない。その確率は $f_c(E_2)\{1 - f_v(E_1)\}$ である。この遷移によるエネルギー $\hbar\omega = E_2 - E_1$ の光子の自然放出率は

$$r_{\text{sp}}(\hbar\omega) = \frac{1}{\tau_r} \rho_c(E_2) \rho_v(E_1) f_c(E_2) \{1 - f_v(E_1)\} \quad (3.6)$$

で与えられるので、トータルの自然放出率は

$$r_{\text{sp}}^{\text{total}}(\hbar\omega) = \frac{1}{\tau_r} \int \rho_c(E') \rho_v(E' - \hbar\omega) f_c(E') \{1 - f_v(E' - \hbar\omega)\} dE' \quad (3.7)$$

となる。

励起がそれほど強くなく、 $E_c - E_F^c \gg k_B T$ でかつ $E_F^v - E_v \gg k_B T$ の場合にはフェルミ・ディラック分布関数は以下のように指数関数で近似できる。

$$f_c(E_2) \simeq \exp\left\{-(E_2 - E_F^c)/k_B T\right\} \quad (3.8a)$$

$$1 - f_v(E_1) \simeq \exp\left\{-(E_F^v - E_1)/k_B T\right\} \quad (3.8b)$$

これを用いると

$$r_{\text{sp}}^{\text{total}}(\hbar\omega) = D(\hbar\omega - E_g)^{1/2} \exp\left(-\frac{\hbar\omega - E_g}{k_B T}\right) \quad (3.9)$$

が得られる。ここで、

$$D = \frac{1}{2\pi^2 \tau_r} \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_F^c - E_F^v - E_g}{k_B T}\right) \quad (3.10)$$

は電流注入による励起強度と温度に依存するパラメータである。これらの式が電流注入による自然放出光スペクトルを与える。その形状を図 6 に示す。このスペクトルの最大値を与える光子エネルギーは

$$\hbar\omega_{\text{max}} = E_g + \frac{k_B T}{2} \quad (3.11)$$

であり、スペクトルの半値全幅は

$$\Delta(\hbar\omega) \simeq 1.8 k_B T \quad (3.12)$$

である。励起を強めると、スペクトル形状は変わらないままスペクトル強度が $\exp\{(E_F^c - E_F^v)/k_B T\}$ 倍大きくなる。これによって実用的な発光強度が得られることになる。

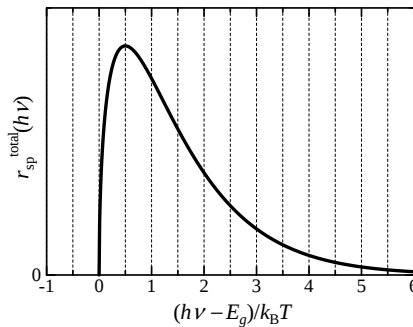


図 6 電流注入時の電子・正孔再結合による自然放出率スペクトル

3.1.3 発光ダイオードの諸特性

厚さ d の活性領域を有する表面発光型 LED を電流密度 i の電流で励起すると、キャリア注入レートは

$$R = \frac{i/e}{d} = \frac{i}{ed} \quad (3.13)$$

となる。定常状態での過剰キャリア密度は

$$\Delta n = R\tau = \frac{i\tau}{ed} \quad (3.14)$$

である。この電流注入によって発生する光子束は

$$\Phi = \eta_i \frac{i}{e} \quad (3.15)$$

で与えられる。このうちの一部が素子外部に取り出され、外部出力光子束は

$$\Phi_o = \eta_e \Phi = \eta_e \eta_i \frac{i}{e} = \eta_{ex} \frac{i}{e} \quad (3.16)$$

で与えられる。ここで、 η_e は取り出し効率、

$$\eta_{ex} = \eta_e \eta_i \quad (3.17)$$

は**外部量子効率 (external quantum efficiency)** とよばれるパラメータである。発光ダイオードの出力光強度は

$$I_o = \hbar\omega\Phi_o = \eta_{ex} \frac{\hbar\omega}{e} i \quad (3.18)$$

となる。発光ダイオードのもっとも実用的な性能評価指数は**パワー変換効率 (wall-plug efficiency)**

$$\eta = \frac{P_o}{IV_o} = \frac{I_o}{iV_o} = \eta_{ex} \frac{\hbar\omega}{eV_o} \quad (3.19)$$

である。ここで、 P_o は出力光パワー、 I は注入電流、 V_o は素子両端に印加された電圧である。また、この式から外部量子効率は

$$\eta_{ex} = \frac{P_o e}{I \hbar\omega} = \frac{P_o / \hbar\omega}{I / e} \quad (3.20)$$

で与えられることがわかる。

3.1.4 可視発光ダイオードの特性

照明のような用途では、人間の明るさの感覚で評価する指標を用いると便利である。^{*9} 人間の平均的な視感度に対して生じる明るさの尺度で評価した単位時間あたりに伝搬する可視光線の量を**光束 (luminous flux)** という。その (パワー) スペクトルが $P(\lambda)$ である光の光束 (単位は lm) は

$$\Phi_{LF} = \int P(\lambda) K(\lambda) d\lambda = K_m \int P(\lambda) V(\lambda) d\lambda \quad (3.21)$$

で与えられる。ここで、 $K(\lambda) = K_m V(\lambda)$ は標準視感度、 $V(\lambda)$ は規格化された視感度で、標準比視感度 (relative luminous efficiency) とよばれる (図 7)。標準比視感度は波長 555 nm で最大となり、現在の基準では

$$K_m = 683 \text{ lm/W} \quad (3.22)$$

^{*9} 人間が目を通じて感じる明るさを基礎にした体系を測光学 (photometry) という。測光学で扱う量は人間の感覚に基礎をおいているので心理物理量とよばれる。

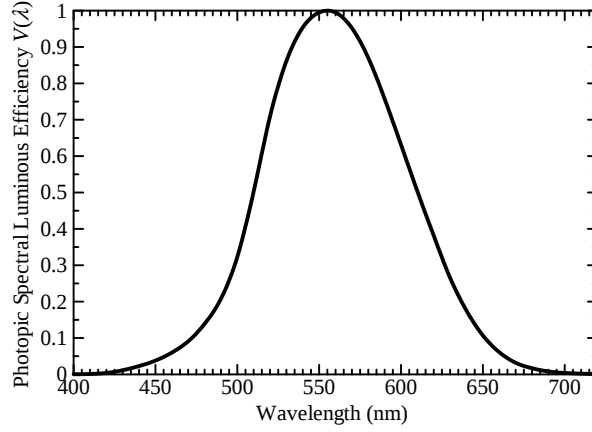


図7 (明所視) 標準比視感度曲線

と定義されている。光に照らされた面上の単位面積あたりの光束をその面の**照度 (illuminance)** という。照度の単位は $\text{lx} = \text{lm}/\text{m}^2$ である。一方、光源を点とみなした時の単位立体角あたりの光束

$$I_{\text{LI}} = \frac{d\Phi_{\text{LF}}}{d\Omega} \quad (3.23)$$

($d\Omega$ は観測方向の微小立体角) を**光度 (luminous intensity)** という。光度の単位は $\text{cd} = \text{lm}/\text{sr}$ である。また、光源が有限の面積を持っているときの単位面積あたりの光度を**輝度 (luminance)** といい、その単位は cd/m^2 である。

照明光源のエネルギー効率を表す指標として、投入電力あたり光源から取り出される全光束

$$\eta_{\text{L}} = \frac{\Phi_{\text{LF}}}{IV_0} \quad (3.24)$$

(I と V_0 は注入電流と動作電圧) で定義される**発光効率 (luminous efficacy)** (単位は lm/W) が用いられる。

3.2 半導体レーザー

半導体における誘導放出による利得を用いてレーザー発振が実現でき、小型、堅牢かつ高効率なコヒーレント光源として広く用いられている。これが半導体レーザー (LD: laser diode) である。

3.2.1 半導体における利得と光増幅

光子エネルギー $\hbar\omega = E_2 - E_1$ (E_2 は電子のエネルギー, E_1 は正孔のエネルギー), 光子密度 n_{ph} の光との相互作用による誘導放出レートは,

$$r_{\text{st}}(\hbar\omega) = Bn_{\text{ph}}(\hbar\omega)\rho_c(E_2)\rho_v(E_1)f_c(E_2)[1 - f_v(E_1)] \quad (3.25)$$

で、吸収レートは

$$r_{\text{ab}}(\hbar\omega) = Bn_{\text{ph}}(\hbar\omega)\rho_c(E_2)\rho_v(E_1)f_v(E_1)[1 - f_c(E_2)] \quad (3.26)$$

で与えられる。ここで、 B はアインシュタインの B 係数である。十分に強い光との相互作用を考えると、自然放出の影響は無視できる。正味の誘導放出レートは

$$r_{\text{st}}^{\text{net}}(\hbar\omega) = r_{\text{st}}(\hbar\omega) - r_{\text{ab}}(\hbar\omega) = Bn_{\text{ph}}(\hbar\omega)\rho_c(E_2)\rho_v(E_1)[f_c(E_2) - f_v(E_1)] \quad (3.27)$$

で与えられる。これが正になれば吸収係数が実質的に負になり、光は媒質中で

$$I(z) = I_0 e^{Gz} = I_0 e^{-\alpha z} \quad (3.28)$$

のように誘導放出によって増幅されることになる。ここで、 $G = -\alpha (> 0)$ は利得係数 (gain constant), e^{Gz} は長さ z の媒質の利得 (gain) とよばれる。光増幅利得を得るためには

$$f_c(E_2) > f_v(E_1) \quad (3.29)$$

が必要であることがわかる。これを反転分布 (population inversion) 状態とよぶ。式 (3.3a), (3.3b) から、この条件は

$$E_F^c - E_F^v > E_2 - E_1 = \hbar\omega \quad (3.30)$$

と書き直せる (Bernard-Duraffourg の条件)。励起が十分に強くなると、半導体は

$$E_F^c - E_F^v > \hbar\omega > E_g \quad (3.31)$$

のエネルギーの光に対して増幅媒質となる。トータルの誘導放出スペクトルは

$$r_{st}^{total}(\hbar\omega) = D \int \rho_c(E') \rho_v(E' - \hbar\omega) [f_c(E') - f_v(E' - \hbar\omega)] dE' \quad (3.32)$$

で与えられる。この利得スペクトルは、注入キャリア密度が増えるにしたがって利得係数ピーク値が増大するとともに、ピークエネルギーが高エネルギー側へシフトしていく。これは、伝導帯の電子と価電子帯のホールがバンド端から順に占有されてくるため (バンドフィリング (band filling) 効果) である。

3.2.2 レーザ発振

一般に、増幅器に正のフィードバックをかけると増幅度が大きくなるが、ある条件で不安定になって発振状態に入る。系全体でフィードバックと増幅とがつりあったときには増幅率は無限大に発散し、0 の入力に対して有限の出力が得られるようになる。

レーザの定常的な発振を考えよう。ファブリ・ペロー共振器の二つの反射鏡 (半導体レーザの場合は半導体結晶のへき開面をそのまま反射鏡とする) のパワー反射率をそれぞれ R_1, R_2 とし、レーザ媒質の利得係数を G とする。光が共振器内を 1 往復する時の利得は

$$A^2 = e^{2GL} \quad (3.33)$$

となる。ここで、 A は往復での振幅増幅率、 L は共振器長 (= レーザ媒質長) である。増幅出力振幅の $\beta = \sqrt{R_1 R_2}$ 倍がフィードバックされるので、発振条件 $\beta A = 1$ は

$$GL + \frac{1}{2} \ln R_1 R_2 = 0 \quad (3.34)$$

となる。実際のレーザ媒質中では多少の吸収・散乱が起こる。このような反射鏡以外の部分での損失をひとまとめにして、一往復で光パワーが $K (< 1)$ 倍になるとき、等価吸収係数

$$\alpha_{eff} = -\frac{1}{2l} \ln K \quad (3.35)$$

を導入しよう。この損失分まで考慮すると、式 (3.34) は

$$(G - \alpha_{eff})L + \frac{1}{2} \ln R_1 R_2 = 0 \quad (3.36)$$

となる。この条件が満足されるとレーザ共振器は発振状態となる。これを**レーザ発振 (laser oscillation)** という。この発振条件は、共振器内での損失と利得が釣り合い、共振器中を一往復した光の振幅が減衰しないで定常に残るための条件となっている。レーザ媒質の利得 G を次第に大きくしていくと、

$$G_{\text{th}} = \alpha_{\text{eff}} + \frac{1}{2L} \ln \left(\frac{1}{R_1 R_2} \right) \quad (3.37)$$

に達したところでレーザ発振が始まる。この、レーザ発振開始に必要な利得係数を**しきい利得 (threshold gain)** という。さらに利得を大きくしようとすると、光パワーが強くなりレーザ遷移上準位の占有数が減少し利得が小さくなってしまいうために、利得と損失が釣り合う点、すなわちしきい利得で安定した発振が継続することになる。すなわちしきい利得は定常発振時の利得でもある。

半導体レーザの場合、式 (3.37) は多少書き換えが必要である。というのは、我々が考えているデバイスは導波層（活性層）のみに利得のある導波路型レーザだからである。活性層・ n 型クラッド層・ p 型クラッド層のパワー閉じ込め係数を $\Gamma_a, \Gamma_n, \Gamma_p$ 、活性層の利得を G_a 、活性層・ n 型クラッド層・ p 型クラッド層の等価吸収係数を $\alpha_a, \alpha_n, \alpha_p$ とすると、

$$G = \Gamma_a G_a \quad (3.38a)$$

$$\alpha_{\text{eff}} = \Gamma_a \alpha_a + \Gamma_n \alpha_n + \Gamma_p \alpha_p \quad (3.38b)$$

なので、ダブルヘテロ型レーザの**しきい利得 (threshold gain)** g_{th} は

$$\Gamma_a G_{\text{th}} = \alpha_{\text{eff}} + \frac{1}{2L} \ln \left(\frac{1}{R_1 R_2} \right) \quad (3.39)$$

で与えられる。通信用の InGaAsP レーザの場合、 $R_1 = R_2 = 32 \%$ 、 $L \simeq 300 \mu\text{m}$ 、 $\alpha \simeq 10 \text{ cm}^{-1}$ なので、 $\Gamma_a g_a \simeq 50 \text{ cm}^{-1}$ である。

半導体レーザへの注入電流を増加させていくと利得スペクトルが成長し、そのピーク値が式 (3.39) を満たす電流 I_{th} (**しきい電流 (threshold current)**) で発振が始まり、共振器内での定在波条件

$$\lambda_m = \frac{2nL}{m} \quad (m = 1, 2, \dots) \quad (3.40)$$

を満たす波長のうち利得スペクトルのピーク付近で最大利得となる波長で発振することになる。

3.2.3 半導体レーザの縦モードと横モード

ファブリ・ペロー型半導体レーザでは、共振器の反射鏡面として、半導体結晶の劈開面をそのまま用いることが多い。この共振器の共振条件は共振器長 L によって決定され、式 (3.40) で与えられる。レーザ発振する可能性のある波長は離散的な値を取り、これをレーザの**縦モード (longitudinal mode)**、あるいは**軸モード (axial mode)** とよぶ。縦モード間隔は、 m が十分大きい場合には

$$\Delta\lambda = \frac{\lambda^2}{2 \left(n - \lambda \frac{dn}{d\lambda} \right) L} \quad (3.41)$$

となる。 $L = 300 \mu\text{m}$ のレーザでは、 $\Delta\lambda$ は 0.3 nm (波長 $0.8 \mu\text{m}$) $\sim 1.1 \text{ nm}$ (波長 $1.55 \mu\text{m}$) で、共振器長の長い他のレーザと比較するとはるかに大きな値である。しかし、半導体レーザの利得スペクトル幅 ($> 10 \text{ nm}$) と比較すると縦モード間隔はずっと小さく、隣接モード間の利得差が極めて小さいために、モード競合が起こりやすくまた、縦多モード発振の原因ともなる。一般的な（縦モード制御をしていない）半導体レーザは低出力時には縦多モード発振するが、レーザ出力を増していくとパ

ワーストは1本の縦モードに集中していき、他のモードのパワーは飽和する。この状態では縦単一モード発振であるが、高速変調時には多モード発振となる（このようなレーザを静的単一モードレーザという）。高速変調時にも単一縦モード発振を維持するレーザ（動的単一モードレーザ）の実現には、特定の波長に対してのみ帰還がかかる特別な構造が必要であり、**分布帰還型 (DFB: distributed feedback)** レーザや**分布型ブラッグ反射 (DBR: distributed Bragg-reflector)** レーザなどが実用化されている。

特別な温度制御をせずに動作している半導体レーザの発振スペクトルを詳細に見ると、光出力の増加に伴って発振波長が長波長側にシフトしていることがわかる。これは、電流の増加に伴って活性領域の温度が上昇しているためである。バンドギャップエネルギーが温度上昇に伴って減少し、その結果、利得スペクトルが長波長側へ移動するため、温度上昇とともに発振モードが長波長のモードへ不連続に移っていく（**モードホッピング (mode hopping)**）。また、各モード波長もゆるやかに長波長シフトするが、これは屈折率の温度依存性によるものである。

実用的な半導体レーザの大部分は、いわゆるストライプ構造を採用している。ストライプの幅は1～数 μm である。ストライプ構造を採用することによって、しきい電流の低減と発振**横モード (transverse mode)**、すなわちビームプロファイルの制御が可能となる。活性層厚は通常しきい電流を小さくするために0.1 μm 程度となっているので、ストライプ型半導体レーザの活性領域のサイズは1～数 μm (幅) $\times$ 0.1 μm (厚さ) 程度と極めて小さい。これは光の波長程度の大きさなので、半導体レーザ光は回折効果によって広がって出射されることになる。

レーザ端面上でのレーザ光の強度分布像を**近視野像 (near-field pattern, NFP)**、端面から十分遠方での光強度分布、すなわち回折像を**遠視野像 (far-field pattern, FFP)** という。ヘテロ接合に垂直な方向では回折広がり角が大きく、 $\theta_{\perp}$ は30～60度、平行な面内では $\theta_{\parallel}$ は通常10～30度である。活性層厚 d を小さくするにつれ近視野像半値全幅 $W_{\perp}$ は小さくなるので遠視野像の半値全角 $\theta_{\perp}$ は広がっていくが、 d が半導体中の波長 λ_0/n よりも小さくなると、光閉じ込め効果が弱くなってクラッドに光がしみ出してしまい、 $W_{\perp}$ はむしろ大きくなり $\theta_{\perp}$ は小さくなる。

いずれにせよ、半導体レーザからの出力光は大きく広がっており、レンズなどを併用する必要がある。しかしながら、接合面に垂直・平行いずれの方向でも単一横モード（基本横モードのみしか伝搬できない）にできるので、ほぼ回折限界への集光が可能である。

3.2.4 半導体レーザの諸特性

半導体レーザを実際に使用するにあたって重要となるいくつかのパラメータをまとめておこう。

まず、動作温度が高くなるとしきい電流が大きくなる。これは、利得スペクトルの広がりとキャリアのオーバーフローが主な原因で、これに加えてオージェ過程による非発光再結合や価電子帯内吸収などが影響している。しきい電流の温度依存性は経験的に

$$I_{\text{th}} \propto \exp(T/T_0) \quad (3.42)$$

で与えられる。 T_0 はしきい電流の温度依存性を特徴づけるパラメータ（特性温度とよばれる）で、これが大きいほど温度依存性の小さい（良い）レーザということになる。InGaP系レーザとAlGaAs系レーザの T_0 は100～150 K程度、InGaAsP系レーザで50～70 Kである。

レーザの効率の目安として、しばしば、

$$\eta_s = \frac{\Delta P}{\Delta I} \quad (3.43)$$

で定義される**スロープ効率 (slope efficiency)** が用いられる。ここで、 ΔI は発振状態での電流の増加

分, ΔP はそれに対応する光出力の増加分で, 通常, W/A (あるいは mW/mA) の単位が用いられる。**外部微分量子効率 (external differential quantum efficiency)** は注入キャリア 1 個につき外部に放出される光子の数で定義され,

$$\eta_{\text{ex}} = \frac{\Delta P / (\hbar\omega)}{\Delta I / e} = \eta_s \frac{e}{\hbar\omega} \quad (3.44)$$

で与えられる (無次元量である)。これは, 注入キャリア 1 個あたり共振器内部に発生する光子の数で定義される**内部微分量子効率 (internal differential quantum efficiency)** η_{in} と以下のような関係にある。

$$\eta_{\text{ex}} = \eta_{\text{in}} \frac{\frac{1}{2L} \ln \frac{1}{R}}{\alpha_{\text{eff}} + \frac{1}{L} \ln \frac{1}{R}} \quad (3.45)$$

$\eta_{\text{in}} = 100 \%$ と仮定すると, $L = 300 \mu\text{m}$, $R = 32 \%$, $\alpha_{\text{eff}} = 20 \text{ cm}^{-1}$ の場合, $\eta_{\text{ex}} = 33 \%$ となる。^{*10}

^{*10} ここでの η_s, η_{ex} は片面からの出力に対して定義されていることに注意。

4 半導体受光デバイス

半導体受光デバイスは、半導体における内部光電効果（**photoelectric effect**）を利用して吸収した光のエネルギーを電氣的出力に変換する。**フォトダイオード（PD: photodiode）**は、光吸収によって発生したキャリア空乏層内の電場で外部回路に取り出して動作する。**太陽電池（photovoltaic cell）**もフォトダイオードの一種である。光情報処理に利用されるフォトダイオードは一般に高速動作が求められるのに対して、太陽電池では外部に取り出す電力への変換効率が重視されるため、これら二種のデバイスは異なった動作モードで使用される。

4.1 フォトダイオード

4.1.1 フォトダイオードの動作原理

pn ダイオードに光を照射すると、光子エネルギーがバンドギャップエネルギーよりも大きければ電子・正孔対が生成する。空乏層内に生成された電子と正孔は内蔵電場によってドリフトし、電子は n 側に、正孔は p 側に移動して外部回路に（逆方向の）電流を生じさせる。空乏層から離れた位置で生成されたキャリアは外部に取り出されないが、空乏層外でも空乏層の近くのキャリアは拡散で一部が空乏層に到達し、ドリフトして外部に信号として取り出される。このフォトダイオードの電流-電圧特性は

$$i = i_s \left\{ \exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) - 1 \right\} - i_p \quad (4.1)$$

で与えられる。これは、通常のダイオードの特性をあらわす第 1 項（ i_s は飽和電流密度）に、光照射によって発生する光電流密度 i_p が加わったものである。図 8 (a) にフォトダイオードの光照射時の電流-電圧特性を示す。

多くの場合、フォトダイオードは強く逆バイアスした状態で使用される。逆バイアスによって空乏層が広がって取り出せるキャリア数が増え感度が向上するとともに接合容量が小さくなって応答速度が上がること、強いバイアスによって空乏層内の電場が強まってドリフト速度が増加して応答速度が上がること、（ $i_s \ll i_p$ なので）応答の線形性が良いことなどがその理由である。

特性向上を目的として、pin フォトダイオードがしばしば用いられる。pin ダイオードでは i 層に電

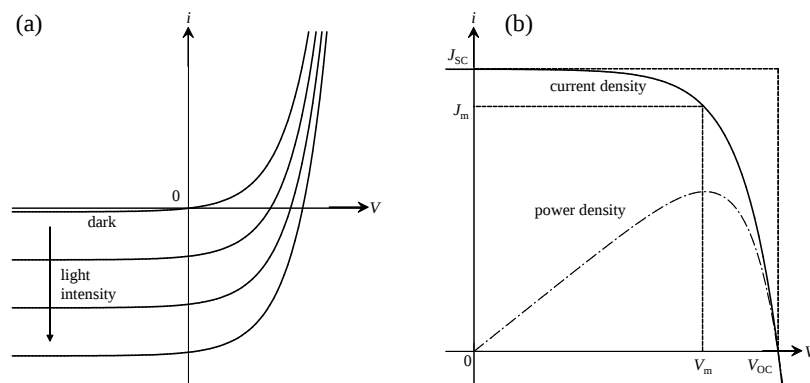


図 8 フォトダイオード (a) と太陽電池セル (b) の電流-電圧特性

場が加わるので、実効的に pn ダイオードの空乏層厚さを大きくすることができ、感度の上昇と応答速度の向上が実現できる。

4.1.2 アバランシュフォトダイオード

フォトダイオードにさらに強い逆バイアスをかけると、空乏層内で起きるキャリアのカスケード（なだれ）（フランス語で avalanche）によるキャリア増倍を利用して感度を向上させることができる。強い電場で加速されたキャリアは衝突電離によって新しいキャリアを励起し、ドリフトして外部回路に取り出されるキャリア数が格段に向上するのである。これが**アバランシュフォトダイオード（APD: avalanche photodiode）**である。強い逆アイアスのために応答速度も向上する。

4.1.3 光検出器の諸特性

受光デバイスに入射した光子数に対する出力電流に寄与するキャリア数の比を光検出器の量子効率といい、

$$\eta = (1 - R) \{1 - \exp(-\alpha d)\} \zeta \quad (4.2)$$

で与えられる。ここで、 R はデバイス表面のパワー反射率、 α は吸収係数、 d は吸収媒質の厚さ、 ζ は外部回路に取り出されるキャリアの割合である。

光検出器の出力電流密度は以下の式で与えられる。

$$i_p = \eta e \Phi = \frac{\eta e I_i}{h \omega} = \mathcal{R} I_i \quad (4.3)$$

ここで、 Φ は入射光子束、 I_i は入射光強度、 $\mathcal{R}$ は光検出器の**受光感度（responsivity）**とよばれる量（単位は通常 A/W が用いられる）で、

$$\mathcal{R} = \frac{\eta e}{h \omega} = \eta \frac{e \lambda}{h c} \quad (4.4)$$

で与えられる。

4.2 太陽電池

フォトダイオードを逆バイアスで用いると、外部に電力を取り出すことができない。太陽光を吸収して電力に変換する**太陽電池（photovoltaic cell）**は順バイアス（図 8 (a) の第 4 象限）で用いる必要がある。図 8 (b) に光照射時の太陽電池セルの電流-電圧特性を示した（ここでは、バイアスの向きが逆になったことに対応して電流の符号を反転させていることに注意）。太陽電池は、一点鎖線で示したセルの出力パワー密度

$$P_{PV} = iV \quad (4.5)$$

が最大になる点に固定して動作させる。太陽電池セルの最も重要な性能評価指標は**電力変換効率（PCE: power conversion efficiency）**であり、

$$\eta_{PCE} = \frac{P_{PV}}{I_i} = \frac{J_m V_m}{I_i} = \frac{J_{SC} V_{OC} FF}{I_i} \quad (4.6)$$

で与えられる。ここで、 J_{SC} は**短絡電流密度（short-circuit current density）**、 V_{OC} は**解放電圧（open-circuit voltage）**、

$$FF = \frac{J_m V_m}{J_{SC} V_{OC}} \quad (4.7)$$

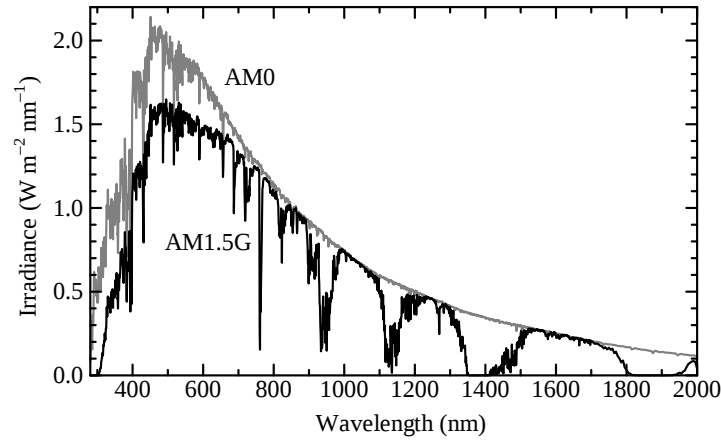


図 9 太陽光のスペクトル。Air Mass 0 (AM0) は地球大気圏外でのスペクトルで強度は 1353 W/m^2 である。Air Mass 1.5 Global (AM1.5G) は緯度 48° の大気下のスペクトルで 1000 W/m^2 (1 sun) に規格化されている。

は**曲線因子 (fill factor, フィル・ファクター)**とよばれる量である。

太陽光は図 9 に示したような連続スペクトル光であり、これを効率よく電力に変換することが太陽電池に求められることになる。短絡電流密度は

$$J_{\text{SC}} = e \int_0^\infty \eta(E) b_s(E) dE \quad (4.8)$$

で与えられる。ここで、 $b_s(E)$ は太陽光の分光光子束密度であり、入射光強度との間には

$$I_i = \int_0^\infty E b_s(E) dE \quad (4.9)$$

の関係が成り立つ。バンドギャップエネルギー E_g 以上のエネルギーの光子に対する量子効率が 1 になるような理想的な状況では、

$$J_{\text{SC}} = e \int_{E_g}^\infty b_s(E) dE \quad (4.10)$$

となり、これは E_g が小さいほど大きくなる。一方、外部回路へ取り出される電圧 $V_m \simeq V_{\text{OC}}$ は原理的に E_g/e を超えることはない。 $E > E_g$ の光子が吸収されても、バンド内緩和のために取り出される電圧はたかだか E_g/e になってしまう。したがって、出力電圧は E_g が大きいほど高くなる。

以上の考察から、理想状態での太陽電池の最大電力変換効率

$$\eta_{\text{PCE}} = \frac{E_g \int_{E_g}^\infty b_s(E) dE}{\int_0^\infty E b_s(E) dE} \quad (4.11)$$

で与えられることになり、これは、適当な大きさの E_g で最大値を取る。Shockley と Queisser は 6000 K の黒体輻射スペクトルに対して最大効率を計算し、 $E_g \simeq 2.2 \text{ eV}$ で最大値 44 % となることを示した。より現実的な状況での計算によると、 $E_g \simeq 1.4 \text{ eV}$ で最大値 33 % となる (**Shockley-Queisser 限界**)。

目次

0	はじめに	1
0.1	講義の目標	1
0.2	教科書・参考書	1
0.3	講義の概要と進め方	1
1	半導体の光学特性	3
1.1	光物性の半古典論	3
1.1.1	フェルミの黄金律	3
1.1.2	相互作用ハミルトニアン	4
1.1.3	半古典論による誘電率	4
1.1.4	寿命とスペクトル幅	6
1.1.5	光の吸収と放出	6
1.2	半導体のバンド間遷移による光吸収	7
1.3	半導体のバンド間遷移による発光	10
1.3.1	熱平衡状態での電子・正孔再結合	10
1.3.2	内部量子効率	10
1.3.3	電子・正孔の注入による発光	11
2	化合物半導体	12
2.1	化合物半導体とは	12
2.2	化合物半導体の結晶構造	12
2.3	化合物半導体の電子構造	13
2.4	化合物半導体混晶	15
2.5	化合物半導体薄膜の作製法	17
3	半導体発光デバイス	19
3.1	発光ダイオード	19
3.1.1	電流注入時のキャリア濃度	19
3.1.2	電流注入時の自然放出スペクトル	20
3.1.3	発光ダイオードの諸特性	21
3.1.4	可視発光ダイオードの特性	21
3.2	半導体レーザ	22
3.2.1	半導体における利得と光増幅	22
3.2.2	レーザ発振	23
3.2.3	半導体レーザの縦モードと横モード	24
3.2.4	半導体レーザの諸特性	25
4	半導体受光デバイス	27
4.1	フォトダイオード	27
4.1.1	フォトダイオードの動作原理	27
4.1.2	アバランシュフォトダイオード	28
4.1.3	光検出器の諸特性	28
4.2	太陽電池	28