

GaN 系化合物半導体 LED 理論設計のための マルチスケール発光シミュレータの開発と応用

○ 松浦 麻子¹、坪井 秀行¹、古山 通久¹、遠藤 明¹、久保 百司^{2,1}、
Carlos A. Del Carpio¹、宮本 明^{3,1}

¹ 東北大学大学院工学研究科応用化学専攻 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-1302)

² 科学技術振興機構さきがけ (〒332-0012 埼玉県川口市本町 4-1-8)

³ 東北大学未来科学技術共同研究センター (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-10)

【緒言】

現在、GaN 系化合物半導体 LED (Light Emitting Diode) は主に信号機や携帯電話などに用いられている。今後、大型液晶ディスプレイや照明器具など広範な領域への応用を可能とするためには、発光の高効率化が必要である。しかし、開発をする上で試作と解析を繰り返すことはコストがかかることなどから、原子レベルの知見に立脚した理論的なデバイス特性予測が必要である。本研究では、LED の理論設計を実現するためにその発光特性を予測する新規手法を開発し、GaN 系化合物半導体 LED に応用した。

【方法】

各層のキャリア移動度は当研究室で開発した量子分子動力学計算プログラム 'Colors' によって求めたキャリアの存在確率密度の空間分布を求め、キャリア移動度推算プログラムを用いることで求めた。デバイスの発光特性は、新規に開発した発光特性予測プログラムによって求めた。計算モデルには p-GaN / p-AlGaIn / InGaIn / n-GaN 量子井戸構造 LED を用いた。

【結果と考察】

まず LED を形成する各層 (p-GaN/ p-AlGaIn/ InGaIn/ n-GaN) の電子状態を計算した。図 1 に Colors によって求めた GaN 及び InGaIn の状態密度を示す。GaN のバンドギャップは 3.36 eV (実験値 3.39 eV)、InGaIn は 2.73 eV (同 2.60 eV) と計算され、実験値と良く一致した結果が得られた。また、GaN では価電子帯上端は主に N の 2p 軌道で形成されており、伝導帯下端は Ga の 3s 軌道から形成されている。InGaIn では荷電子帯の上端に In の 2p 軌道、伝導帯下端には In の 3s 軌道も寄与していることがわかった。表 1 に各層の材料のバンドギャップの計算値と実験値を示す。表 1 より高精度に系の電子状態が再現できていることがわかる。この電子状態を基にキャリア移動度推算プログラムでキャリア移動度を求めた。表 2 に LED 各層のキャリア移動度を示す。計算値は n-GaN の電子の移動度の実験値¹⁾によって規格化した。表 2 より、本手法により今まで不可能であったキャリア移動度の理論予測に成功したといえる。さらにこのキャリア移動度を用い、発光特性を予測することが可能な新規デバイスシミュレータを開発した。このシミュレータではまず、発光デバイスモデルをメッシュに細分化し、各メッシュに先に求めたキャリア移動度を割りつける。次に正負両極からキャリアを注入し、モンテカルロ法を用いてキャリアの移動シミュレーションを行い、同じメッシュに電子と正孔が同時に存在したとき必ず再結合するものとした。

以上より、量子論に基づく実デバイススケールの発光特性の予測を可能とする新規マルチスケール発光シミュレータを開発することに成功した。本手法を用いることで発光効率が高い LED の設計指針に有効な知見が得られるものと期待される。

【文献】1) S. X. Jin *et al.*, Appl. Phys. Lett., **76**, 631 (2000).

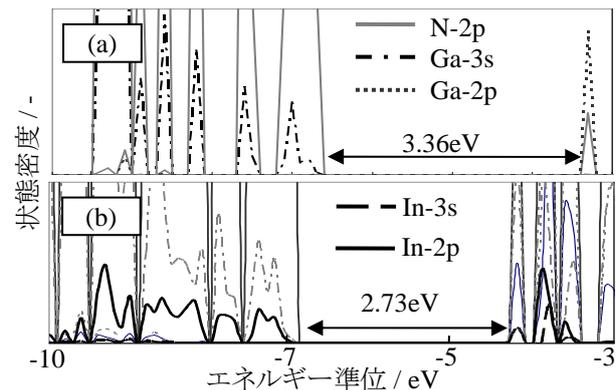


図 1 部分状態密度 (a) Ga₃₂N₃₂ (b) In₆Ga₂₆N₃₂

表 1 各層のバンドギャップ (eV)

	実験値		計算値
GaN	3.39	GaN	3.36
		Mg doped GaN	3.44
		Si doped GaN	3.42
AlGaIn	3.80	Mg doped AlGaIn	3.81
		InGaIn	2.73

表 2 各層のキャリア移動度 (cm²/Vs)

	正孔		電子	
	計算値	実験値	計算値	実験値
p-GaN	0.45×10	1.20×10	8.20×10 ²	-
p-AlGaIn	1.15×10	-	3.88×10 ²	-
Interface	2.22×10	-	2.00×10 ²	-
InGaIn	0.60×10	-	2.88×10 ²	-
n-GaN	0.68×10	-	3.10×10 ²	3.10×10 ²