

学位論文題名

A Study on Finite-Element Analysis of
Quantum Effect Structures and Devices

(量子効果構造及びデバイスの有限要素法解析に関する研究)

学位論文内容の要旨

半導体超薄膜を積層して得られる量子効果構造及びデバイスは、近年の超薄膜作製技術の発展に伴い、理論及び実験の両面から精力的に研究が進められている。特に量子井戸(QW : Quantum Well)、ポテンシャル障壁(PB : Potential Barrier)、ならびに無限周期構造を有する超格子(SL : Superlattice)は、様々な線形・非線形光デバイスや超高速電子デバイスなどへの応用が期待され、実用の段階に達してきているものも多い。一方、最近の計算機技術の発達に伴い有限要素法(FEM : Finite-Element Method)、差分法(FDM : Finite-Difference Method)などを中心とした計算手法が研究され、様々な分野への応用が試みられている。このような状況のもとで、量子効果構造の計算機シミュレーションの重要性は以前にも増して高まっており、種々の数値解法が提案されている。量子効果構造の数値解析は、有効質量近似のもとでシュレディンガー方程式を解き、包絡線関数を求める問題に帰着される。ところが、有効質量近似のもとでは包絡線関数はヘテロ界面において連続とは限らず、その境界条件は包絡線関数とその導関数の一次結合で表されることが報告されており、界面行列によってこの境界条件を統一的に扱う方法が提案されている。しかしながらこれまで報告された量子効果構造の数値解析においては、このような一般的な境界条件は考慮されておらず、扱える材料がGaAs-AlGaAs系に限定されていた。

本論文は、こうした状況のもとで、任意の材料よりなり、任意のポテンシャル形状を持つ量子効果構造に対する汎用性ならびに信頼性の高い数値解法の開発についての研究成果をまとめたものである。具体的には、QW、PB、及びSLのそれぞれについてFEM解析手法を新たに提案し、それらの妥当性、有効性を多くの数値計算例により検証している。3次エルミート線要素を用いることにより界面行列の導入を可能にし、量子効果構造の数値解析において初めて任意材料の系を扱う手法を確立している。更に、上記FEM解析に基づいたQWの光学特性の計算法、

及び多重 PB における共鳴トンネリング電子の束縛寿命の計算法についての提案も行っている。以下に本論文の概要を示す。

第 1 章では、本論文の背景、目的、及び構成について述べている。

第 2 章では、本研究の理論的背景として、有効質量近似と界面行列について論じている。これらは以後の各章で述べる量子効果構造の FEM 解析の理論的基礎をなすものである。

第 3 章では、まず、微分方程式の数値解法である FEM について簡単に紹介し、その基本的考え方である変分法とガラーキソ法について述べている。次に、線要素に関して論じており、具体的に、1 次、2 次ラグランジュ線要素及び 3 次エルミート線要素について、形状関数の導出を行っている。以後の各章では、FEM による定式化に 3 次エルミート線要素を主に用いる。この要素は、要素節点における関数値とその微係数を用いて定式化するため、前述の界面行列が導入でき、任意材料よりなる量子効果構造の解析が可能となる。

第 4 章では、有効質量近似のもとでシュレディンガー方程式にガラーキソ法を適用することにより、各要素に対する要素行列を導出している。近似関数として、3 次エルミート要素を用い、ヘテロ界面に節点を二重に配置することによって、界面行列を要素行列に導入することが可能となる。本章で導出した要素行列は、以後の章において共通して用いられるものである。

第 5 章では、まず、任意ポテンシャル形状を持った QW に関する FEM 解析手法と、この手法を基礎に QW の光学的特性を数値解析する手法について論じている。本解析では井戸に束縛された電子あるいは正孔を扱う。このような問題に対して第 4 章で述べた FEM を適用すると、行列の一般固有値問題が得られ、この解から電子あるいは正孔の固有エネルギーが求められる。具体的に、矩形 QW 及び電界を印加した QW の解析を行い、本手法の妥当性を確認している。次に、本手法を基に、量子井戸の光吸収スペクトルと、電界印加時の屈折率変化を計算する手法を提案している。矩形 QW に関して解析を行い、実測値と比較することにより計算法の妥当性を確認している。また、吸収スペクトルの電界依存性に大きな非線形性を有する二重量子井戸構造を提案している。また、本章では、1 次、及び 2 次ラグランジュ要素を用いた定式化も行い、計算精度と計算時間に簡単な考察を加えている。更に、ポテンシャル関数を節点の値で展開することにより計算時間を短縮する方法についても検討を行っている。

第 6 章では、まず任意の PB の FEM 解析法を提案している。障壁領域に FEM を適用し、障壁外領域に対する解析解と接続することにより、行列方程式を得る。この解から、PB に入射する電子の反射係数を計算することができる。具体的に、矩形 PB と二重 PB を例として透過係数の解析を行い、本手法の妥当性を検証している。更に、種々のポテンシャル形状を持った多重

PB に関しても解析を行い、多くの知見を得ている。次に、上記の FEM 解析を基にした共鳴トンネリング電子の束縛寿命の計算法を開発し、数値例により本手法の妥当性を確認している。

第 7 章では、任意ポテンシャル形状が周期的に無限に続く SL 構造に関する FEM 解析手法を提案し、これによりミニバンド構造が計算できることを示している。周期ポテンシャルの一周期に対して FEM を適用し、その両端の節点に周期的境界条件を課すことにより SL 構造は行列の固有値問題として定式化できる。従って、与えられた波数に対する固有エネルギーが求まり、SL 中のミニバンド構造が得られる。具体的に、矩形 SL に関して解析を行ない、解析解と比較することにより本手法の妥当性を確認している。更に、各種ポテンシャル形状を持つ SL について、ミニバンド構造の解析を行い、本手法の有用性を検証している。

第 8 章では、本研究で得られた成果の総括を行っている。

学位論文審査の要旨

主 査 教 授 小 柴 正 則

副 査 教 授 伊 藤 精 彦

副 査 教 授 長 谷 川 英 機

副 査 教 授 永 井 信 夫

半導体超薄膜を積層して得られる量子効果構造は、様々な新機能デバイスへの応用を目指して精力的に研究が進められている。最近の計算機技術の発展に伴い、この分野においてもできるだけ汎用性、信頼性の高い数値解法に対する要求が高まってきており、種々の数値解法が提案されている。ところが、従来提案されている量子効果構造の数値解析においては、ヘテロ界面における一般的な境界条件が考慮されておらず、その適用は GaAs-AlGaAs 系のみに限定されていた。本論文は、こうした状況のもとで、任意材料・任意ポテンシャル形状の量子効果構造に対する汎用性並びに信頼性の高い数値解法の開発についての研究成果をまとめたものである。

第 1 章では、本論文の背景、目的、及び構成について述べている。

第 2 章では、本研究の理論的背景として、有効質量近似の理論と、ヘテロ界面における一般的な境界条件を表す界面行列について論じている。

第 3 章では、まず、微分方程式の数値解法である有限要素法 (FEM) について簡単に紹介し、

その基本的考え方である変分法とガラーキン法について述べている。次に、1次、2次ラグランジュ線要素及び3次エルミート線要素について論じている。以後の各章では、FEMによる定式化に3次エルミート線要素を主に用いる。この要素を用いたことにより、前述の界面行列が導入でき、任意材料よりなる量子効果構造の解析が可能となる。

第4章では、有効質量近似のもとでシュレディンガー方程式にガラーキン法を適用することにより、各要素に対する要素行列を導出している。3次エルミート線要素を用い、ヘテロ界面に節点を二重に配置することによって、界面行列を要素行列に導入している。本章で導出した要素行列は、以後の章において共通して用いられるものである。

第5章では、まず、任意ポテンシャル形状を持った量子井戸(QW)に関するFEM解析手法と、この手法を基礎にQWの光学的特性を数値解析する手法について論じている。本解析では井戸に束縛された電子あるいは正孔を扱う。このような問題に対して第4章で述べたFEMを適用すると、行列の一般固有値問題が得られ、この解から電子あるいは正孔の固有エネルギーが求められる。具体的に、矩形QW及び電界を印加したQWの解析を行い、本手法の妥当性を確認している。次に、本手法を基に、量子井戸の光吸収スペクトルと、電界印加時の屈折率変化を計算する手法を提案している。矩形QWに関して解析を行い、実測値と比較することにより計算法の妥当性を確認している。また、本章では、1次、及び2次ラグランジュ要素を用いた定式化も行い、計算精度と計算時間に簡単な考察を加えている。更に、ポテンシャル関数を節点で展開することにより計算時間を短縮する方法についても検討を行っている。

第6章では、まず任意のポテンシャル障壁(PB)のFEM解析法を提案している。障壁領域にFEMを適用し、障壁外領域に対する解析解と接続することにより、行列方程式を得る。この解から、PBに入射する電子の反射係数を計算することができる。具体的に、矩形PBと二重PBを例として透過係数の解析を行い、本手法の妥当性を検証している。更に、種々のポテンシャル形状を持った多重PBに関しても解析を行い、多くの知見を得ている。次に、上記のFEM解析を基にした共鳴トンネリング電子の束縛寿命の計算法を開発し、数値例により本手法の妥当性を認識している。

第7章では、任意ポテンシャル形状が周期的に無限に続く超格子(SL)構造に関するFEM解析手法を提案し、これによりミニバンド構造が計算できることを示している。周期ポテンシャルの一周期に対してFEMを適用し、その両端の節点に周期的境界条件を課すことによりSL構造は行列の固有値問題として定式化できる。従って、与えられた波数に対する固有エネルギーが求まり、SL中のミニバンド構造が得られる。具体的に、矩形SLに関して解析を行い、解析解

と比較することにより本手法の妥当性を確認している。更に、各種ポテンシャル形状を持つSLについてミニバンド構造の解析を行い、本手法の有用性を検証している。

第8章では、本研究で得られた成果の総括を行っている。

以上のように本論文は、任意材料・任意ポテンシャル形状の量子効果構造の特性を精度よく評価することが可能な数値解法を開発し、各種量子効果デバイスの設計の基礎を確立したもので、量子エレクトロニクス、光エレクトロニクスの進歩に寄与するところが大きい。よって、著者は、博士（工学）の学位を授与される資格あるものと認める。