

(様式2)

学位論文の概要及び要旨

氏名 小田泰丈

題目 第一原理計算による化合物半導体無極性表面の結晶成長の研究

学位論文の概要及び要旨

現在GaNは一般的にサファイア(Al_2O_3)基板上に極性面を成長させ発光素子などに使われている。しかし、サファイア基板と窒化ガリウム(GaN)の間には大きな格子不整合が存在し結晶構造も異なるためそれらに起因する結晶欠陥のために変換効率が低く、また極性面を用いているために内部電界のため発光効率が低下する問題がある。これらの問題を解決するにはGaNと同じ結晶構造で格子定数の近い基板を用いて内部電界の発生しない面(無極性面や特定の半極性面)を成長すればよい。つまり、GaNと同じ構造の物質で最も格子不整合の小さい酸化亜鉛(ZnO)を基板として用い、成長面には a 面や m 面を用いればよい。しかし、ZnO無極性面とGaNとの界面の構造や適切な成長条件、成長素過程などはわかっていない。そこで本研究では、第一原理計算を用いてZnO無極性面とGaNの界面の構造や成長素過程を明らかにすることにより、適切な成長条件を見つけ出した。また、ZnO上にGaNがある程度成長した後は、ヘテロエピタキシャル成長からホモエピタキシャル成長へと変化するためGaN無極性面のホモエピタキシャル成長に関しても成長素過程を明らかにし適切な成長条件を見つけ出した。得られた結果は以下の通りである。

GaN(10-10)ホモエピタキシャル成長およびZnO(10-10)上のGaNヘテロエピタキシャル成長について

表面にガリウム原子と窒素原子が一つずつ吸着した場合は、ウルツ鉱(wurtzite)構造をとるときの本래の格子位置から $[-12-10]$ 方向に半周期ずれた位置へGaNダイマーを形成する。成長条件をGa-richにすることによりガリウム原子のセルフサーファクタント効果が働くことによりこの構造が解消させる。成長条件が窒素過多(N-rich)の場合には、窒素吸着原子が表面のGaNダイマーから窒素原子を引きちぎり窒素分子(N_2)を作り表面から離脱する。 N_2 分子を作り表面から離脱することにより局所的に成長条件が変わり成長条件の制御が困難になる。成長条件がstoichiometricの場合には、局所的にはガリウム過多(Ga-rich)の場合と同様にガリウム原子のセルフサーファクタント効果によって半周期ずれた構造が解消される。しかし、局所的にはstoichiometricな条件のままの部分もあり、その部分は $[0001]$ 方向にGaNダイマーの一次元的な構造ができ、その構造が出来るとその後成長条件がGa-richになっても一次元的な構造は解消されない。これは結晶の欠陥の原因となるため理想的な結晶成長を行

うためには、Ga-rich条件を用いることが望ましい。これらの結論はGaNのホモエピタキシャル成長もZnO上のGaNへテロエピタキシャル成長も同じである。

GaN(11-20)面のホモエピタキシャル成長について

GaN(11-20)の場合はGaN(10-10)の場合とは異なり、ガリウム原子のセルフサーファクタント効果なしでGaN(11-20)表面上にGaNダイマーはwurtzite構造本来の格子位置に形成される。しかしダイマー近傍にガリウム原子が存在しないときに窒素原子が表面吸着すると表面のGaNダイマーからN原子を引きちぎりN₂分子を作り表面から離脱する。適切に結晶成長させるためには常にガリウム原子が先行吸着した状態で窒素原子が吸着する必要がある。つまり、成長条件はGa-richが望ましい。

ZnO(11-20)面上のGaNへテロエピタキシャル成長について

平坦なZnO表面に窒素原子を単原子吸着させると、吸着原子が基板表面の酸素原子置換しZnO基板の中に潜り込む。また、ガリウム原子を1つ先行吸着させた状態で窒素原子を吸着させた場合でも窒素吸着原子が基板表面の酸素原子と置換しZnO基板の中に潜り込む。この窒素原子の潜り込みを止めるためには、1つの窒素原子の周りに2つガリウム原子が存在する状態を作ればよいことがわかった。これはつまり、ZnO基板上にガリウム原子を1ML分吸着させた状態で窒素原子の吸着を行えば良いということである。そうすることで窒素原子の潜り込みが抑えられ、窒素原子をwurtzite構造本来の格子位置へと導くことができる。ZnO(11-20)基板とGaNとの界面を理想的な構造とするためには表面全体をガリウム原子で覆ってから窒素原子を吸着させる、つまり界面付近での成長条件は強いGa-richが望ましい。