

(様式7)

学位論文審査結果の要旨

氏名	小田 泰丈
審査委員	委員長 石井 晃 委員 安東孝止 委員 小谷岳生 委員 _____ 委員 _____
論文題目	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
<p>審査結果の要旨</p> <p>現在 GaN は一般的にサファイア (Al₂O₃) 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が、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) を成長すればよいのだが、これらの面での結晶成長はまだ未解明の部分が多い。</p> <p>本論文は、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、適切な成長条件を求めた研究である。第一原理計算によれば、GaN (10-10) の場合、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) 構造の本来の格子位置から [-12-10] 方向に半周期ずれた位置へ GaN ダイマーを形成するが成長条件を Ga-rich にすればガリウム原子のセルフサーファクタント効果が働き、この構造が解消される。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が窒素分子 (N₂) とそて離脱し、成長条件が stoichiometric の場合には、局所的に [0001] 方向に GaN ダイマーの一次元的な構造ができ、これは結晶の欠陥の原因となる。また、ZnO (11-20) 基板と GaN との界面を理想的な構造で成長させ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 が望ましいことを、第一原理計算から明らかにした。</p> <p>即ち、無極性面での GaN ホモエピタキシャル成長あるいは無極性面 ZnO 上 GaN ヘテロエピタキシャル成長の場合、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ことを明らかにした。つまり、成長条件は Ga-rich が望ましいという点を明らかにした。</p> <p>以上、本論文は無極性化合物半導体の結晶成長条件を成長表面上の原子の動きを第一原理計算で追求することから求めたもので、博士 (工学) の学位論文に値するものとして認められる。</p>	