

(様式 2)

学位論文の概要及び要旨

氏 名 藤原 勝敏 印

題 目 酸化亜鉛結晶成長メカニズムの第一原理的研究

学位論文の概要及び要旨

酸化亜鉛 (ZnO) 半導体は、青色発光ダイオード (LED) として現状で先行しておる窒化ガリウム (GaN) に比べ、室温での発光効率に優れている。ZnO 半導体の青色 LED 実用化には ZnO 単結晶の高品質化が重要である。また、ZnO 半導体を作成するための ZnO 基板がないため異種材料基板表面上に ZnO 薄膜を成長したものを使用することからも、ZnO 結晶成長メカニズムの理解が不可欠である。原子の動的過程を理解するには、実験による追跡が不可能であることから、量子力学的アプローチである第一原理計算が有効である。密度汎関数法に基づく第一原理計算は、結晶のバンドギャップ値を正確に再現できないが、全エネルギーの相対値を用いた議論は信頼性が高い。このことを踏まえて、本研究では結晶のポテンシャルエネルギー面を計算することで ZnO 基板、および異種材料基板表面上の Zn、O 各吸着原子の動的過程、および Zn と O 吸着原子の相互作用について解析を行った。

「SiC(0001) 上 Zn、O 吸着原子の相互作用と交換相関関係」では、交換相関関係の効果を変えても Zn、O 吸着原子の動的過程の解析に影響しないことを確認した。また、ZnO 薄膜を Zn 極性面とするには、Zn-O 吸着原子相互作用により供給比を化学量論組成 (stoichiometry) とする必要があることを示唆する。以上の結果は実験結果をうまく説明した結果である。

「ZnO(0001) 結晶成長メカニズム」では、Zn 吸着原子が ZnO 結晶成長を促進する、いわゆるセルフサーファクタント効果をもつことを示した。そのため Zn 過剰供給 (Zn-rich) 条件により結晶成長速度が促進される。しかしながら、ZnO(0001) 表面は O 吸着原子が終端するため、Zn-rich 条件で O 吸着原子が表面拡散しにくいため表面平坦性が失われる。以上のことから高品質 ZnO(0001) 結晶を得るための成長条件として、セルフサーファクタント効果を得るために Zn-rich 供給条件とし、高温条件など表面平坦性を促進する条件が必要であることを示唆する。表面平坦性を促進する条件として、高温アニール自己バッファ層技術が提案されていることから、実験結果を理論計算が実証した結果といえる。

「サファイア基板上 ZnO 結晶成長メカニズム」では、O 吸着原子がサファイア基板と ZnO 薄膜との面内配向関係が 30 度回転した関係を示す。各吸着原子の動的過程から O 極性面となることを示し、成長条件に依存しないことを示唆する。以上の結果は実験結果を良好に説明した結果である。

「GaN(0001) 基板上 ZnO 薄膜成長メカニズム」では、Ga 極性面 GaN(0001) 上 ZnO 薄膜が典型的な ZnO 結晶成長条件で Zn 極性面となることを示した。また、実験報告がないが、N 極性面 GaN(000-1) 上 ZnO 薄膜は低温成長により Zn 極性面となることを示唆する。以上の考察は「ZnO(0001) 基板上 GaN 薄膜成長メカニズム」の実験、および計算結果を基にしている。