

(様式7)

## 学位論文審査結果の要旨

氏名	藤原 勝敏
審査委員	委員長 教授 安東 孝止 印 委員 教授 石井 晃 印 委員 助教授 市野 邦男 印 委員 _____ 印 委員 _____ 印
論文題目	酸化亜鉛結晶成長メカニズムの第一原理的研究
<h3>審査結果の要旨</h3> <p>酸化亜鉛(ZnO)半導体はバンドギャップエネルギーを近紫外線光波帯(～3.5eV)に持ち、資源性、環境性に優れたワイドギャップ半導体として世界的規模で研究が開始されている新材料である。本研究は、大型高速計算機を用いた「第一原理計算手法によるZnO結晶成長メカニズムの解明」を進めたものである。量子力学的理論アプローチとして実績のある密度汎関数法(LDA)を第一原理計算の基本ツールとして使用した。注目した結晶構造のパラメーターはZnO結晶表面のポテンシャルエネルギー面の決定であり、この(理論的)知見をベースにして結晶成長の素過程に関する重要な情報および成長条件を得た。本研究で得られた主要な研究(理論)成果を以下にまとめる：</p> <p>①亜鉛原子の「セルフサーファクタント効果」：ZnO(0001)結晶基板上のZnO成長機構において、Zn吸着原子が成長を顕著に促進する「セルフサーファクタント効果」を発現することを示した。この効果は結晶成長過程においてZn過剰供給(Zn-rich)条件による成長速度の促進に利用される。この効果を利用して高品質ZnO(0001)結晶を得るための実際の成長条件として、「Zn-rich供給条件+(断続的)高温成長条件」が不可欠なものであることを実験との対応で検証した。</p> <p>②動的・成長シミュレーション技法：ZnO結晶表面の第一原理計算で得た原子配列構造およびバリエーション(障壁)エネルギー値をもとに、モンテカルロ技法で結晶成長過程を動的にシミュレーションする技法を開発した。この技法により分子線エピタキシャル(MBE)成長でのZn/Oの供給比率と成長速度、および結晶表面の平坦性の定量的な関係を理論的に検証した。</p> <p>③結晶表面原子の極性制御の指針：薄膜の(エピタキシャル)結晶成長において結晶表面の極性制御が重要であるが、本研究では高品質のZnO結晶薄膜を成長する条件として「Zn極性が優れている」ことを検証した。またこの極性制御の知見は、ZnO結晶基板(ホモ成長)に限定されず、GaN結晶基板(N原子極性)でのZnO成長にも適応することが可能となる。</p> <p>上記研究成果は今後飛躍的に発展する新しいワイドギャップ半導体ZnO結晶成長技術の高度化に資するだけでなく、可視～近紫外線光波帯の電子・光機能デバイス開発研究に大きな貢献が期待されるものであり、本論文は博士(工学)として十分な価値を有するものと判定する。</p>	