

審 査 の 結 果 の 要 旨

氏 名 郭 堯

窒化インジウム(InN)は、絶縁破壊電界や飽和電子速度が大きいことから、高速電子素子用の半導体材料として近年大きな注目を集めている。素子応用のためには高い結晶性を有する InN 薄膜結晶の実現が不可欠であるが、従来のサファイア基板上への InN 薄膜結晶成長では、結晶構造の違いに起因した高密度の結晶欠陥が発生するため高品質な InN 結晶を得ることは困難であった。一方、近年の低温結晶成長技術の進展によって、従来の高温結晶成長手法では使用できなかった基板材料を用いることが可能となり、InN との格子不整が小さい安定化ジルコニア基板を用いて InN 薄膜の結晶成長が実現されている。しかしながら、安定化ジルコニア基板上 InN 薄膜のさらなる高品質化を実現し InN を素子応用に供するためには、その結晶成長や極性決定のメカニズムを明らかにすることが必要である。本論文は、サファイアに代わる基板材料としてジルコニアに注目し、InN 薄膜成長における成長初期過程を第一原理計算によって明らかにすることで、InN 高品質化の検討に関してまとめたものである。

第 1 章では、InN 系窒化物半導体の現状と電子素子作製に関する問題点が挙げられている。InN の結晶品質改善のためには、従来のサファイアに代わる基板材料としてイットリウム安定化ジルコニア(YSZ)基板を用いることが有効な手段の一つであり、さらに InN 薄膜/YSZ 基板のヘテロ界面の精密な制御が高品質化のために必要であることが記されている。また、これらの現状を背景として、本研究の目的が述べられている。

第 2 章では、本論文において用いた第一原理計算の手法について述べられている。

第 3 章では、ジルコニア表面にイットリウムが析出した場合と析出していない場合について、In と N 原子の吸着エネルギーを調べ、その結果に基づいた考察が記されている。具体的には、インジウム(In)原子と窒素(N)原子についてその吸着エネルギーを計算したところ、イットリウム析出の有無に関わらず、N 原子の方が大きいことが明らかになった。これは、成長初期過程においてジルコニア表面には N 原子が優先的に吸着することを示唆している。また、対称性の高いサイトでの吸着エネルギーを調べたところ、各サイト間における吸着エネルギーの差は、In 原子の場合よりも N 原子の場合の方が大きいことが分かった。これは、N 原子は安定サイトに吸着することで固定化されるのに対し、In 原子は容易に表面上を拡散できることを示している。また、N 原子の吸着位置が、InN の格子が形成された後も維持されると仮定した場合、InN/ジルコニアの結晶配向関係は InN(0001) // ジルコニア(111)、InN[11-20] // ジルコニア[1-10]になると予想され、これは実験結果と一致するものであった。また、イットリウム析出層の有無が、吸着エネルギーの値に影響を与えることも明らかになった。

第 4 章では、ジルコニア基板上に成長した InN 薄膜の極性決定メカニズムについて述べ

られている。Y 析出の無いジルコニア表面上では In 極性および N 極性の InN 薄膜のエネルギー差は小さいが、Y 析出の有るジルコニア表面上では In 極性 InN が N 極性 InN よりも安定に存在することが分かった。これは、Y 析出の無いジルコニア上では極性制御は難しいが、Y 析出の有るジルコニアを用いることで In 極性 InN 薄膜成長が優先的に起こることを示唆している。この結果は実験結果とよく一致しており、第一原理計算による成長初期過程の考察から、InN の極性を予測できることを示している。

第 5 章では、Mn が表面に析出したジルコニアを、InN と格子不整の小さい新規基板材料として提案し、その優位性を第一原理計算から示している。具体的には第一原理計算の結果から、InN と基板の面内配向関係が格子不整を最小にする方位になること、および In 極性 InN の成長が優先的に起こることを示している。

以上のように、本論文では、ジルコニア上への InN 系窒化物半導体の結晶成長について、その初期過程や極性決定メカニズムを第一原理計算によるアプローチから解明し、さらに新しい基板材料として Mn 析出ジルコニアが有望であることを示している。本論文で得られた成果は、今後の InN 系窒化物半導体の結晶成長および InN 系電子素子の発展に大きく寄与するものとして高く評価できる。よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。