

京都大学	博士（工 学）	氏名	石 井 良 太
論文題目	GaN および AlN の励起子変形ポテンシャルの同定と (Al, Ga)N 系歪量子構造の物性予測		
<p>(論文内容の要旨)</p> <p>本論文は、GaN と AlN の励起子変形ポテンシャルを実験的に同定し、紫外高効率発光に向けた (Al, Ga)N 系歪量子構造の設計手法を論じた結果をまとめたものであって、第 8 章からなっている。</p> <p>第 1 章は序論であり、本論文の背景と目的、そして本論文の構成について述べている。紫外および深紫外領域において、有害元素を含まない高効率発光デバイスの実現が望まれている。この社会的要請を達成できる材料候補として、GaN および AlN を中心とした窒化物半導体が注目されている。しかしながら、(Al, Ga)N 系材料の基礎物性は未解明であることが数多く存在し、(Al, Ga)N 系材料の有している潜在可能性を最大限に引き出せていないのが現状である。そこで本研究では、(Al, Ga)N 系材料において、効果が顕著と考えられる歪誘起効果に着目し、歪誘起効果の程度を表す励起子変形ポテンシャルの実験的同定を行う。そして、この励起子変形ポテンシャルを用いて、紫外高効率発光に向けた新規 (Al, Ga)N 系歪量子構造の提案を行うことを目的とする。</p> <p>第 2 章は、ウルツ鉱構造における励起子有効ハミルトニアン的一般化という章題である。最初に、ウルツ鉱構造の結晶点群に対して群論を導入し、電子、正孔、および励起子に対して既約表現を導入している。そして、GaN と AlN の伝導帯および価電子帯、そして励起子微細構造に関して、これまで明らかにされたことと未解明であることについて述べている。続いて、不変量の理論を用いて、ウルツ鉱構造における励起子有効ハミルトニアンの構築を行っている。ここでは、結晶場分裂相互作用、スピン軌道相互作用、電子正孔交換相互作用、および歪相互作用の 4 つの相互作用を取り込んでいる。また、不変量の理論から導かれるハミルトニアンを考察することにより、従来良く使用される擬立方晶近似を導出し、その背景と物理について述べている。最後に、ユニタリ変換を作用させた新たな励起子有効ハミルトニアンを提案し、任意面方位における固有状態の解析を可能としている。</p> <p>第 3 章は、GaN における全ての励起子変形ポテンシャルの同定という章題である。最初に、励起子変形ポテンシャルを実験的に同定する従来の手法は、いくつかの問題点を抱えていることを述べている。そこで本論文では、新たな評価手法として、一軸性応力下における無極性面および半極性面バルク基板の光学測定を提案している。本手法は、先行研究の手法における問題点を全て解決できる手法であり、特に擬立方晶近似を使用しなくて良いところにその特徴がある。ここでは、一軸性応力下における無極性面および半極性面 GaN バルク基板の偏光反射測定を行うことにより、GaN の全ての励起子変形ポテンシャルを実験的に同定することに成功し、GaN の励起子変形ポテンシャルに関して、擬立方晶近似が破綻していることを明らかにしている。</p>			

京都大学	博士 (工 学)	氏名	石 井 良 太
<p>第4章は、AlNにおける全ての励起子変形ポテンシャルの同定という章題である。AlNの励起子変形ポテンシャルを実験的に同定する従来の手法は、第3章におけるGa_{0.5}N_{0.5}の場合と同様の問題を抱えていることを最初に述べている。そこで本論文では、AlNに対しても同様に、一軸性応力下における無極性面および半極性面バルク基板の光学測定を行っている。これらによって、AlNの励起子変形ポテンシャルを全て同定することに成功し、同時に擬立方晶近似の破綻を見出している。</p> <p>第5章は、AlNにおける電子正孔交換相互作用の解明という章題である。第4章で、AlNにおける大きな電子正孔交換相互作用の存在が示唆されたので、本章では異なるアプローチからその存在を検証している。最初に、<i>c</i>面ホモエピタキシャルAlN薄膜のフォトルミネッセンスの偏光依存性を測定している。そして、第4章において予測される結果と極めて良い一致を見せることを示している。さらに、温度依存性も測定することで、他の可能性を排除し、第4章での仮説を強固にしている。AlNにおける電子正孔交換相互作用の大きさは、典型的なIII-V族およびII-VI族化合物半導体の中で最大であることを見出し、新たな指標を提示することで、その大きさを材料間で系統的に評価できることを示している。</p> <p>第6章は、(Al,Ga)N系歪量子構造の物性予測という章題である。第3章から第5章の研究によって、(Al,Ga)N系材料における種々の物性定数が高精度に同定可能となった。そこで本章では、それらを用いて、(Al,Ga)N系歪量子構造の信頼性の高い物性予測を行っている。最初に、本研究で提示している物性定数を用いた計算結果と、従来良く使用されている物性定数を用いた計算結果は、大きく異なることを示している。そして、<i>r</i>面Ga_{0.5}N_{0.5}/AlN歪量子井戸構造の面内偏光度は、両者の予測が大きく異なることを見出し、本構造の面内偏光度を実測した結果、前者を支持する実験結果を得ることに成功している。また、本章では、量子閉じ込め効果の影響に関する知見も見出し、種々の(Al,Ga)N系歪量子構造に対して、禁制帯幅、偏光度、および有効質量など様々な物理量の計算を行っている。</p> <p>第7章は、紫外高効率発光に向けた新規(Al,Ga)N系歪量子構造の提案という章題である。第6章までで、(Al,Ga)N系歪量子構造における物性を信頼性高く予測する手法を確立している。そこで本章では、第1章において述べた社会的要請を達成するため、紫外高効率発光を実現するための(Al,Ga)N系歪量子構造の提案を具体的に行っている。最初に、高効率発光ダイオードを実現するための設計指針を述べ、具体的にどのような構造を作製すれば良いかを提案している。次いで、低しきい値レーザダイオードを実現するための設計指針を述べ、具体的なレーザ構造を提案するとともに、レーザ発振に必要な透明キャリア密度を見積もることに成功している。</p> <p>第8章は結論であり、本論文で得られた成果について要約している。また、本研究に関連する分野に対する今後の展望について述べている。</p>			

(論文審査の結果の要旨)

本論文は、GaN および AlN の励起子変形ポテンシャルの同定と、(Al, Ga)N 系歪量子構造の物性を信頼性高く予測することを目標に研究した成果についてまとめたものであり、得られた成果は次のとおりである。

1. ウルツ鉍構造における励起子有効ハミルトニアン of 拡張
 - 任意面方位における励起子固有状態の解析を可能とした
2. GaN の励起子変形ポテンシャルの同定
 - GaN の全ての励起子変形ポテンシャルを実験的に同定
 - GaN における擬立方晶近似の破綻の発見
3. AlN の励起子変形ポテンシャルの同定
 - AlN の全ての励起子変形ポテンシャルを実験的に同定
 - AlN における擬立方晶近似の破綻の発見
4. AlN における電子正孔交換相互作用の解明
 - AlN における巨大な電子正孔交換相互作用の存在を発見
 - 電子正孔交換相互作用の大きさを材料間で系統的に比較する手法の提案
5. (Al, Ga)N 系歪量子構造の信頼性の高い物性予測
 - 本論文で同定した物性定数を用いた理論計算により、従来では説明できなかった実験結果を記述可能となった
 - (Al, Ga)N 系歪量子構造の物性を精度良く予測可能となった
6. 紫外高効率発光に向けた新規 (Al, Ga)N 系歪量子構造の提案
 - (Al, Ga)N 系歪量子構造の設計手法の確立
 - 紫外高効率発光に向けた知見の獲得

本論文は、GaN および AlN の励起子変形ポテンシャルを全て実験的に同定し、(Al, Ga)N 系歪量子構造の信頼性の高い物性予測を可能としたことから、学術上、實際上寄与するところが少なくない。よって、本論文は博士（工学）の学位論文として価値あるものと認める。また、平成25年1月31日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行い、申請者が博士後期課程学位取得基準を満たしていることを確認し、合格と認めた。