



Title	Terahertz Time-domain Spectroscopy of Oxide Substrates
Author(s)	王, 棲
Citation	大阪大学, 2025, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/101668
rights	
Note	やむを得ない事由があると学位審査研究科が承認したため、全文に代えてその内容の要約を公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

Abstract of Thesis

Name	(WANG KE)
Title	Terahertz Time-domain Spectroscopy of Oxide Substrates (テラヘルツ時間領域分光法をもちいた酸化物基板の物性評価)
Abstract of Thesis	
<p>As communication technologies advance rapidly, the demand for higher frequencies becomes more critical. The anticipated arrival of 6G technology marks a significant milestone, as it integrates terahertz (THz) frequencies into its framework, setting a new standard for high-frequency applications. This shift to THz ranges necessitates the development of specialized devices, which in turn rely on substrates possessing optimal properties for effective functionality. At the forefront of scientific exploration in this THz-domain is Terahertz Time-Domain Spectroscopy (THz-TDS). This technique, bridging the conventional microwave methods and far-infrared optical approaches, plays a pivotal role in the study of materials suited for THz technology. Unlike traditional methods, THz-TDS excels in non-destructively probing the electrical and optical properties of various materials, including semiconductors, dielectrics, and notably insulators—where conventional electrical measurements often fall short. This dissertation investigates the application of Terahertz Time-Domain Spectroscopy (THz-TDS) to assess the properties of oxide substrates crucial for advancing 6G technologies. It focuses on the temperature-dependent optical constants, phonon dynamics, and carrier behaviors of materials such as magnesium oxide (MgO), titanium dioxide (TiO_2), garnet dielectrics ($Gd_3Ga_5O_{12}$, $Y_3Al_5O_{12}$, and substituted GGG), and gallium oxide ($\beta\text{-}Ga_2O_3$). By employing both THz-TDS and Fourier-transform infrared spectroscopy (FT-IR) under various thermal conditions, the study provides significant insights into material behaviors at high frequencies, confirming the efficacy of THz-TDS for non-destructive material evaluation and its superiority over traditional methods like FT-IR, which require cryogenic cooling. The results enhance our understanding of substrate properties affecting high-frequency device performance, contributing to the development of technologies integral to 6G communications. The construction of this dissertation is illustrated as below: Chapter 1 gives a general introduction of Terahertz science and the importance of oxide substrates especially in high-frequency devices. Chapter 2 outlines THz generation and detection principles, introducing the data analysis techniques and theoretical models employed, such as the Drude and Lorentz oscillator models. A case study on magnesium oxide (MgO) concludes this chapter. Chapter 3 presents findings on titanium oxide (TiO_2), focusing on its temperature-dependent refractive indices derived from THz-TDS and FT-IR measurements. The limitations of FT-IR in stability underline the significance of developing a transmissive THz-TDS setup for broadband applications. Chapter 4 discusses the evaluation of garnet dielectrics including $Gd_3Ga_5O_{12}$ (GGG), $Y_3Al_5O_{12}$ (YAG), and substituted GGG (SGGG), from 80 to 500 K. This chapter details the use of THz-TDS and FT-IR measurements alongside theoretical calculations to explore temperature-dependent phonon behaviors and the effects of substitution on optical constants and electronic properties. Chapter 5 examines Gallium oxide ($\beta\text{-}Ga_2O_3$), focusing on its anisotropic properties assessed via THz-TDS. Both unintentionally doped and iron-doped samples are analyzed for their temperature-dependent conductivity and carrier behaviors using Drude and Drude-Smith models, complemented by Lorentz oscillator modeling to explore phonon behaviors. Chapter 6 concludes the thesis by summarizing the key findings and underscoring the contributions of this research to the field of materials evaluation using THz-TDS.</p>	

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏名 (WANG KE)		
	(職)	氏名
論文審査担当者	主査 教授	斗内政吉
	副査 教授	片山竜二
	副査 准教授	村上博成
	副査 教授	小島一信
	副査 教授	森勇介
	副査 教授	片山光浩
	副査 教授	丸山美帆子
	副査 教授	尾崎雅則
	副査 教授	近藤正彦
	副査 教授	森伸也
	副査 教授	廣瀬哲也

論文審査の結果の要旨

通信技術の急速な進展に伴い、電子デバイスがより高い周波数への要求が増大している。6G技術の登場が予想されており、これはテラヘルツ (THz) 周波数を枠組みに統合することで、高周波アプリケーションの新たな基準を設定する重要なマイルストーンである。THz範囲へのこのシフトは、効果的な機能を持つための最適な特性を持つ基板に依存する特殊デバイスの開発を必要とする。このTHz領域での科学的探求の最前線には、テラヘルツ時間領域分光法 (THz-TDS) がある。この技術は、従来のマイクロ波方法と遠赤外光学的アプローチを架橋し、THz技術に適した材料の研究において重要な役割を果たしている。従来の方法とは異なり、THz-TDSは、半導体、誘電体、特に従来の電気測定が困難な絶縁体を含む様々な材料の電気的および光学的特性を非破壊的に探査することに優れている。本研究では、THz-TDSを用いて、酸化チタン (TiO_2)、ガドリニウムガーネット (GGG)、イットリウムアルミニウムガーネット (YAG)、置換ガドリニウムガーネット (SGGG)、と酸化ガリウム (Ga_2O_3) の単結晶を評価し、テラヘルツ領域における物性を議論した。以下に本論文で得られた主たる研究結果を要約する。

まず、 TiO_2 の異方性および温度依存の複雑な屈折率は、線形偏光されたTHz波を用いてTHz-TDSで分析された。 b 軸および c 軸に沿った複数屈折率の実部は温度が上がるにつれて低下することが観察され、 b 軸に関する以前の研究を確認し、 c 軸に沿った初めて測定した。さらに、透過型THz-TDSでアクセス可能な周波数範囲を超えて TiO_2 の特性を探るためにFT-IRを使用して追加の測定が行われた。しかし、FT-IRからの複雑な屈折率の結果はTHz-TDSのものと一致しなかった。THz-TDSとFT-IRの間の測定および分析プロセスの違いによって、これらの相違が生じることが重要である。FT-IRの測定は室温条件下でTHz-TDSと一致したが、サンプルとそのホルダー間の不均一な熱膨張による反射角の変化により、異なる温度での信頼性は低かった。この制限は、反射型システムにより大きな影響を与え、FT-IRを使用した包括的な温度依存研究を妨げることが多い。これにより、透過型THz-TDSは熱ノイズの影響を受けにくく、THzおよびIRスペクトルの両方で材料の広帯域スペクトル分析に適している。

また、GGG、YAG、SGGGにおける80Kから500Kの温度範囲で低周波数フォノンを探査するために広帯域THz-TDSを用いて評価した。検出可能な周波数範囲内で、GGGのT01およびT04フォノン振動、YAGおよびSGGGのT01フォノンの振動を観測し、温度依存の誘電率および吸収スペクトルを明らかにした。GGGのT02およびT03のような検出不可能なフォノンモードは、フォノン振動からの高吸収に起因する。フォノン周波数と減衰パラメータはローレンツ振動子モデルを用いて抽出され、フォノン周波数と減衰の温度依存の増加を明らかにし、一貫した振動強度を維持した。これらの発見は、有限変位法と密度汎関数理論 (DFT) 計算を用いた計算解析によって支持され、フォノン周波数の変化は主に結晶の熱膨張に起因するとされた。熱膨張とフォノン非調和性からのフォノン周波数の変化への寄与は、グリューネイゼンパラメータを使用して議論された。GGGの置換効果もSGGG単結晶で探求され、わずかな置換がフォノン動力学とデバイス工学における材料の互換性に及ぼす潜在的な影響が強調された。SGGGとGGGの両方が熱的に安定しているが、SGGGの置換がTHz波の吸収を影響し、その熱安定性をわずかに低下させることを示唆している。

さらに、この研究は、無意図的にドープされた (UID) およびFeドープされたサンプルを含む β - Ga_2O_3 の異方的な温度依存の光学応答を測った。THz-TDSは従来の導電性測定ではアクセスできないキャリアの挙動についてユニークな洞察を提供した。複数導電性は複数屈折率から導出され、キャリアダイナミクスはそれぞれドルーデモデルとドルーデ・スミスモデルを使用して解釈された。 a 軸のキャリアは自由電子のように動いて、 c 軸のキャリアは局在されているとフィッティング結果は示唆した。さらに、Feドープのサンプルの a 軸における移動度は他の参考文献と比較して格別に高かったと分かった。このような発見は、特に高抵抗のFeサンプルでは従来の電気測定が失敗する可能性があるため、THz-TDSのような光学的方法の利点を強調している。さらに、Feドープされた β - Ga_2O_3 の異

方性T01フォノンの温度依存性も調査された。これらの発見は、特に異方性キャリア伝導を理解することにおいて、広帯域半導体の研究開発に大きく寄与することが期待される。

以上のように、本論文は半導体や誘電体材料をTHz-TDSを用いて評価した。THz分光法と計算解析を組み合わせて、ガーネット結晶および他の材料の低周波数フォノンの挙動の理解を進め、これはマグネット光学からスピントロニクスまでの分野での新しい材料およびデバイスの開発に不可欠で、広帯域半導体および異方性キャリア伝導の研究開発に大きく寄与すると期待されている。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。