

Title	InS半導体の電子帯構造とその光学的異方性に関する研究
Author(s)	財部, 健一
Citation	
Issue Date	
Text Version	ETD
URL	<a href="http://hdl.handle.net/11094/2557">http://hdl.handle.net/11094/2557</a>
DOI	
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

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

氏名・(本籍)	たから	べ	けん	いち
学位の種類	工	学	博	士
学位記番号	第	7600	号	
学位授与の日付	昭和	62年	3月	20日
学位授与の要件	学位規則第5条第2項該当			
学位論文題目	InS半導体の電子帯構造とその光学的異方性に関する研究			
論文審査委員	(主査)			
	教授	浜川	圭弘	
	(副査)			
	教授	難波	進	教授 山本 錠彦 教授 邑瀬 和生
	教授	西野	種夫	

### 論文内容の要旨

本論文はⅢ-VI族化合物半導体InSの電子帯構造と光学的異方性、及び化学結合に関する一連の研究成果をまとめたもので、本文6章と謝辞からなっている。

第1章では、Ⅲ-VI族化合物半導体にInSに関するこれまでの研究の沿革について概説し、本研究の目的と意義ならびにこの分野において本論文が占める位置を明らかにしている。

第2章では、InSの結晶成長について簡単に述べ、得られた試料を用いて行った基礎吸収端近傍の偏光吸収測定、2-20eV領域にわたる反射測定などの結果より明らかとなったInSの光学的性質についてまとめてある。1.5-3.0eVの偏光吸収測定により、基礎吸収端が間接遷移であり、a、b各偏光に許容遷移であることを示し、さらに、間接遷移吸収の理論式を用いた解析よりInSの価電子帯が異方性の大きな電子帯であることを述べている。また、b偏光吸収係数がa偏光吸収係数より、測定領域全体にわたって2-4倍大きいことを明らかにした。2-20eV領域の偏光反射率から、Kramers-Krönig変換により誘電関数を求めると共に、偏光変調分光の測定結果とあわせて帯間遷移のいくつかを同定し、まとめてある。吸収測定に見られたのと同様の光学的異方性が、誘電関数虚数部の2-3.2eVに現れることをはじめて見いだした。

第3章では、InSの電子帯構造を経験的擬ポテンシャル法(EPM)により計算し、得られた結果をまとめてある。群論的考察より、Brillouin域内では固有値はスピン縮重以外はなく、また境界面上では2重縮退となることを示した。8個の高対称点および12本の高対称線上で指標表を求め、これをもとに電気光学遷移に対する偏光選択則を求め明らかにしてまとめてある。次に、EPMを用いてInS電子帯構造計算を行い、波動関数の対称性も含めたエネルギーバンド図をはじめて明らかにした。この結果よ

り、価電子帯頂上は偶然縮重したV, T点で、伝導帯の底は $\lambda$ 線上(0, 0, 0.7)にあり、従って基礎吸収端は間接遷移となり、また、直接吸収端はT点の遷移に対応することを示した。これらの結果は偏光選択則も含め実験結果とよく一致することがわかった。個々の帯間遷移を明らかにしただけでなく誘電関数を2-9 (eV)にわたって計算し、実験から求めた誘電関数をよく再現していることを示し、計算されたバンドエネルギー図の有効性を示すと共に、また、2-3.2eVの光学異方性もバンド計算により理解できることを明らかにした。第4章では、ダイヤモンドアンビルセルを用いてInS結晶の吸収・反射測定により得られた基礎間接および直接吸収端ならびに高次の帯端の圧力依存性に帯する実験原価とEPMバンド構造計算結果を用いた考察についてまとめている。これらの帯端が圧力下で揃ってred shiftするという測定決きは、他の半導体のよく知られた振舞いとは著しく相違することがはじめて明らかになった。EPMバンド計算の結果に基づいてこの実験結果を解析したところInS結晶におけるIn-In結合が圧力下で結合長を伸ばしソフト化することに起因することを明らかにした。このことは、InSの価電子帯と伝導帯がIn-In結合、反結合状態により形成されているとして理解できることを明らかにした。

第5章では'special' K-point法により求めた価電子の電荷分布を基にしてInS結晶における化学結合に帯する考察結果をまとめている。S原子の3s電子による非結合状態、In-S結合、In-In結合状態が存在することが明らかになった。また、In-S結合はp電子による $\delta$ 結合の性質を持っており、Inのsとp電子による混成は少ないことがわかり、このことが2-3.2eVにおけるInS結晶の工学的異方性の起源であることをはじめて明らかにした。

第6章では、第2章から第5章までの研究成果を総括して、本研究で得られた結論を述べている。

## 論文の審査結果の要旨

III-VI族化合物半導体InSは結晶構造の特異性に起因する光学的異方性を有する新しい半導体として注目されている。本研究は、この新しい半導体の光学的異方性を系統的に測定するとともに、電子帯構造や電荷分布などを計算した結果をまとめたものである。

InSは斜方晶系の異方性結晶で、等方性結晶とは違って大きな光学的異方性がある。本研究では、基礎吸収端近傍での吸収スペクトルの偏光特性、2-20eV領域にわたる偏光反射スペクトルを系統的に測定し、基礎吸収端が間接型遷移で、a, b各偏光に許容遷移で、価電子帯の大きな異型性を示すとともに、偏光反射スペクトルより求めた誘電関数における異型性をも明らかにした。これら光学的異方性に関する実験結果をより明確にするために経験的擬ポテンシャル法によってバンド計算を行い、はじめてInSの電子帯構造を明らかにした。その結果、InSの価電子帯は偶然縮重したY, T点で、伝導帯は $\lambda$ 点に存在することを明らかにするとともに、計算結果は光学スペクトルにおける偏光選択則ともよく一致していることを明確にした。

また、バンド計算の結果は個々の帯間遷移点を明らかにしただけでなく、計算された誘電関数が実験

的に求めたものをよく再現していることが明らかになった。

InSの大きな光学的異方性の起源をより明確にするために、高圧下での光学スペクトルを測定し、帯端が圧力下でred shiftするという、他の半導体とは著しく異なる結果をはじめて確認された。この結果は、バンド構造による解析より、InS結晶におけるIn-In結合が圧力下で結合長を伸ばしソフト化することに起因することが判明した。このことは、InSの価電子帯と伝導帯が、それぞれIn-In結合、反結合状態より形成されているとして理解され、電荷分布に対する計算結果ともよく一致していることも確認され、InS半導体の電子帯構造の詳細が明らかにされた。

以上のように、本論文はInSの光学的異方性を実験的に明らかにするとともに、電子帯構造の計算することによって、InS結晶の物性に対する新しい知見を与えるものであり、学位論文として価値あるものと認める。