

非極性 ZnO の結晶対称性の破れと電子構造の相関

Crystal symmetry breaking and electronic band structures on nonpolar ZnO

松井裕章

Hiroaki Matsui

東京大学工学系研究科バイオエンジニアリング専攻・電気工学専攻

Department of Bioengineering, the University of Tokyo, Hongo Tokyo 113-8656

Department of Electrical Engineering and Information Systems,

The University of Tokyo Hongo Tokyo 113-8656

偏光性を示す光学フィルターの紫外域における透過性は 30%程度と大変低い。故に、紫外及び深紫外域で高い偏光性を示す光学材料の実現が望まれる。本研究では、非極性 ZnO の結晶対称性を操作し、理論的観点から紫外域で高い偏光性を示す最適な条件を見出す。更に、理論的考察から見出された最適条件を実験的に実現させていく。

非極性 ZnO 薄膜の電子バンド構造は、薄膜面内の異方的格子歪に大変敏感である。スピン・軌道相互作用まで考慮した  $k \cdot p$  摂動法から、格子歪と電子遷移エネルギーの相関を抽出した (図 1)。また、各エネルギー遷移における励起子遷移の振動子強度を評価した (図 2)。結果として、薄膜試料面内に圧縮歪 ( $\epsilon_{yy} < 0, \epsilon_{zz} < 0$ ) を誘起することで高い紫外偏光性を実現することができることを理論的に見出した。更に、実験的に面内圧縮歪を導入した非極性 ZnO 薄膜において、高い偏光性が同様に確認された。本発表では、理論的な材料デザインを基盤として、高性能な光学材料に繋げた一例として報告する。

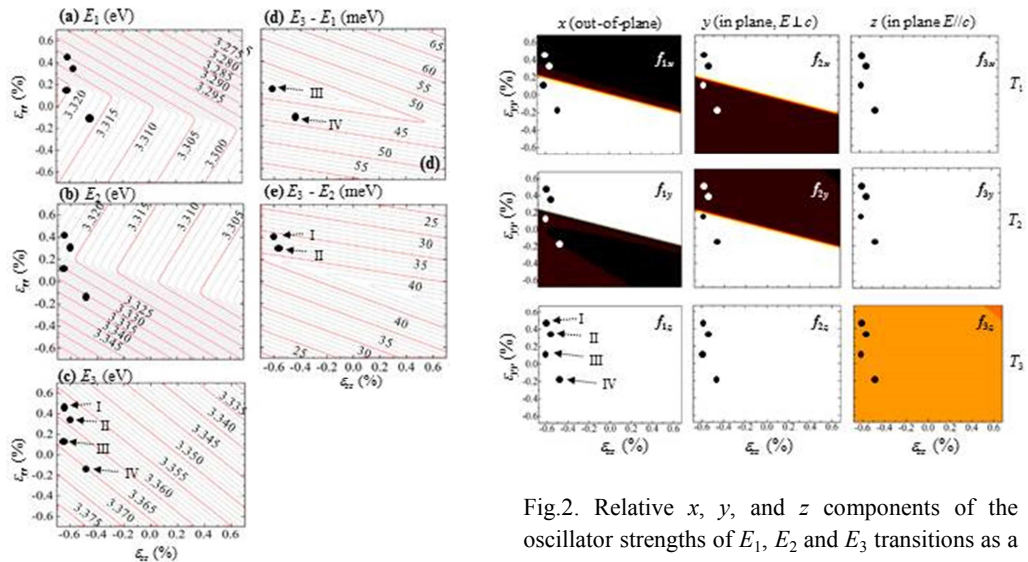


Fig.1. Calculated (a)  $E_1$ , (b)  $E_2$  and (c)  $E_3$  energies as a function of in-plane strain  $\epsilon_{yy}$  and  $\epsilon_{zz}$  for  $a$ -plane ZnO layers at 300 K. (d) Energy difference  $E_3 - E_1$  and  $E_3 - E_2$  as a function of in-plane strains.

Fig.2. Relative  $x$ ,  $y$ , and  $z$  components of the oscillator strengths of  $E_1$ ,  $E_2$  and  $E_3$  transitions as a function of in-plane strain  $\epsilon_{yy}$  and  $\epsilon_{zz}$  for  $a$ -plane ZnO layers at 300 K.