

# 大学院教育支援機構（DoGS）海外渡航助成金 報告書

## Outcome report

計画名 Plan	ダイヤモンド発光特性のシミュレーションと国際学会での研究発表
氏名 Name	戸塚 大貴
研究科・専攻・学年 Graduate school/Division/Year level	理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻 修士課程2回
渡航国 Country	スウェーデン、ベルギー
渡航日程 Travel schedule	2024年2月26日 ~ 2024年3月16日

- ページ数に制限はありません。No limits on the number of pages
- 写真や図なども組み込んでいただいて結構です。You can include pictures or illustrations.
- 各項目について具体的に記述してください。Please fill in each item specifically.
- 日本語または英語で記載ください。Please use Japanese or English.

### 渡航計画の概要 Outline of the travel plan

ダイヤモンドは有害な水銀を使ったランプに代わる深紫外の材料として注目を浴びている。渡航者はダイヤモンド発光ダイオードの発光効率の向上に向けて基礎研究を実験、シミュレーションの両面から行っている。本渡航の目的はダイヤモンド中の格子欠陥が発光特性に与える影響に対する理解を深めることである。そのために①国際学会の参加と②シミュレーション技術の習得の2つを設定する。①に関しては2/28～3/1にベルギー・ハッセルトで開かれる「Hasselt Diamond Workshop」で発表する。本学会は昨年の参加者が289名とダイヤモンドにおける世界最大級の国際学会であり、結晶成長の専門家など様々なバックグラウンドをもつ海外の研究者が参加する。彼らの発表を聞き、議論することでフィードバックをもらうことを目的とする。②に関しては、ダイヤモンドのキャリアのモンテカルロシミュレーションの第一人者であるスウェーデン・ウプサラ大学のJ. Isberg教授の研究室に滞在し、モンテカルロシミュレーションの手法を学ぶ。そこで、ダイヤモンド中に分布する格子欠陥の一種である転位の数や状態を決定し、それが発光特性において重要なキャリア再結合に与える影響を明らかにすることを目的にする。

### 成果 Outcome

国際学会での口頭発表によって自身の研究を発信することができた。また、質疑応答の時間や発表後の休憩時間に様々な質問やフィードバックをいただくことができた。自身の発表に加えて多くの研究者の発表を聞くことができたのは本学会に参加したことの一つの成果である。

ダイヤモンドの合成方法や欠陥の検出方法などを様々な研究者から学ぶことができた。特にフランス・Grenoble Alpes 大の研究者の発表は、渡航者と同じ種類の欠陥である転位と結晶成長の関係に関するものであり、渡航者の研究テーマである転位に関して理解を深めることができた。

本学会は1日あたり2時間半に及ぶ、研究者同士の交流の時間が設けられている。この長さは国内学会では見られないものである。渡航者はこの機会を利用し、多くの研究者と議論を行うことができた。特に物質・材料研究機構、フランス・Grenoble Alpes 大、ドイツ・Augsburg 大の研究者らとは研究分野が近いとため有益なフィードバックをいただくことができた。

学会終了後は、ウプサラ大のJ. Isberg教授の下でCOMSOL Multiphysicsというソフトを使ったシミュレーションの手法を学んだ。正負の電荷をもつキャリアからなる励起子と呼ばれる

準粒子が転位にトラップされる効果を計算することで、転位が発光特性に与える影響を調べた。本研究では、今までほとんど議論されてこなかった転位の種類や異方性を取り込んで計算した。その結果、転位の特性に依存して空間的に異なる発光の分布が生じることが分かった。この転位周りの異方性は以前、渡航者が扱った平均場のモデルでは記述できない新しい知見である。また、数値計算によってトラッピング効果が支配的になる面積を計算することで、転位が発光の指標となる発光量子効率に与える影響を定量的に評価することができた。

## **今後の展望** Prospects for the future

本学会への参加によって得られたフィードバックと J. Isberg 教授との共同研究で得られた結果を論文として投稿予定であり、現在その原稿を執筆中である。今後も本学会で知り合った研究者や J. Isberg 教授と交流を続け、論文を完成させる予定である。



学会での口頭発表の様子



スウェーデン滞在の最終日に開催された Fika(スウェーデン式のお茶会)