【121】

氏　名(本　籍)	竹内誉羽(たけうちよはね)(岡山県)
学位の種類	博　士(工　学)
学位記番号	博甲第 1,872 号
学位授与年月日	平成10年3月23日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
審査研究科	工学研究科
学位論文題目	**不純物添加による砒化ガリウム単結晶の微細構造への影響** (四重極章動核磁気共鳴法による研究)

主　査	筑波大学教授	理学博士	中塚宏樹
副　査	筑波大学教授	工学博士	川辺光央
副　査	筑波大学助教授	工学博士	喜多英治
副　査	筑波大学講師	工学博士	佐々木正洋
副　査	北海道大学助教授	理学博士	恵良田知樹

論文の内容の要旨

化合物半導体砒化ガリウム（GaAs）では転位等の格子欠陥の減少を目的として，電気的に中性な不純物が比較的高濃度ドーピングされることがある。このような高濃度の不純物元素を母体結晶がどのように受け入れいるか，また転位密度減少の機構やGaAs中の様々な輸送現象の実態により近づくために詳細な結晶構造を知ることは本質的に重要である。本研究ではGaAs母体結晶の不純物ドーピングによる影響について他の相互作用に影響されにくく四重極相互作用を観測することができる二次元nutation NMR法を使用した。また測定結果を解釈するために分子動力学シミュレーションや連続体近似による考察も行った。

実験には無ドーピング試料（以下GaAs:none）とInをドーピング試料（以下GaAs:In）を使用した。またSiやZn, Te, Alをドーピングした試料についても測定を行った。Bruker MSL-400 NMR分光器（静磁場9.4 T）によりnutation NMRを測定した。他にスピンエコースペクトルやNQR（核四重極共鳴）スペクトルも必要に応じて測定した。

GaAs:noneのnutation patternから結晶全体としてEFGは生じず，転位は少なくとも結晶全体には影響を及ぼさない。一方GaAs:Inのnutation patternからは結晶内にInの存在によってEFGが生じていて，そのスペクトルはPowder patternであると言う特徴がある。Ga核のnutation patternについては四重極結合定数（QCC）は93kHzで非対称パラメータ（η）が1.0としたシミュレーションの結果と非常に近いことが分かった。また古典的分子動力学シミュレーションを行い，各原子の周りのボンド長の平均値を求めて電場勾配を導出した。大まかな傾向としては両方の元素とも12,3Åぐらいから25Å程度までほぼ一定と見なせる部分がある。特にGaでは，その時のQCCの値が40～50kHz程度になっており，nutation NMRの結果とオーダーは一致する。またInの周りの電場勾配は0 kHzになった。弾性連続体近似を用いて結晶中格子欠陥を扱うと$\eta=1$が必要となる。$\eta=1$で等方的な電場勾配は，全体としては一様な膨張になる分布したひずみ場によって説明することができる。

これらの結果から，実験で得られたV_{ZZ}がほぼ一定で$\eta=1$のpowder分布になって現れていることは，結晶が不純物によりひずむとき，できるだけ元の構造を保とうとするためその力と不純物によって巨視的には立方対称性が崩れていることとの，平衡により保たれていると考えられる。

審 査 の 結 果 の 要 旨

本研究は，半導体結晶中の格子欠陥を調べるために，四重極相互作用を高感度に観測するために二次元nutation NMR法を適用したものである。通常のNMR法では多結晶パターンからは相互作用の大きさや非対称パラメータを正確には決められないが，この方法の適用でその大きさが正確に決められ，しかも非対称パラメーターが1であると言う新しい事実が明らかにされた。この方法は筆者らにより最初に適用され，その結果見いだされた重要な成果と考えられる。

よって，著者は博士（工学）の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。