

氏名(本籍)	宮崎剛英(熊本県)		
学位の種類	工学博士		
学位記番号	博甲第890号		
学位授与年月日	平成3年3月25日		
学位授与の要件	学位規則第5条第1項該当		
審査研究科	工学研究科		
学位論文題目	Theoretical Study of Microscopic Processes in Silicon Epitaxy (シリコンエピタキシャル成長の微視的過程に関する理論的研究)		
主査	筑波大学教授	理学博士	岡崎 誠
副査	筑波大学教授	工学博士	川辺 光 央
副査	筑波大学教授	理学博士	中尾 憲 司
副査	筑波大学助教授	工学博士	井上 雅 博
副査	筑波大学助教授	理学博士	青木 秀 夫

論 文 の 要 旨

結晶のエピタキシャル成長は、物質設計の具体的手段の一つとして、重要であり、近年広汎な研究が行なわれている。この論文は、エピタキシャル成長の基本的メカニズムの原子的過程を、明らかにすることを試みたものである。著者はSi(001)表面に、Si原子を吸着させた系の構造を、第一原理に基づいて最適化し、吸着エネルギーの空間変化から原子の拡散の異方性を明らかにしている。次に、その結果に基づいて、ステップフロー型結晶成長の現象を調べ、新しい知見を得ている。

第1章は序論であり、Si(001)表面の構造と電子状態について、研究の現状を概観し、さらに微傾斜面上のステップフロー成長の問題点を整理し、本研究を位置付けている。

第2章は、本論文の中心部であり、ダイマー構造をもつSi(001)-2×1表面上でのSi吸着原子の拡散の障壁エネルギーの異方性を計算している。Si吸着原子のxy座標を固定した条件下で、表面と吸着原子からなる系のエネルギーを最小にするように、原子配置と電子状態を同時に最適化した。この計算を吸着原子のxy座標を変えて行なうことにより、吸着エネルギーの空間変化が得られ、いろいろな方向での拡散の障壁エネルギーを見積もった。計算は、6原子層スラブモデルを用い、2×1構造の最小単位胞について行なった。局所擬ポテンシャルによる局所密度汎関数法で電子状態を計算し、構造の最適化には、最大勾配降下法を用いた。その結果、拡散のエネルギー障壁は、ダイマー列に平行な方向では0.6eVであり、垂直な方向には2.0eV(いずれも1吸着原子当り)であることが分かった。これは、Si原子の表面拡散の異方性が非常に大きく、拡散が容易な方向は、ダイマー列に平行な方向であることを示すもので、重要な知見である。

第3章では、Si (001) 微傾斜面上での結晶成長プロセスとして、とくに高温で重要なステップフローの様子を、モンテカルロシミュレーションにより調べている。A型、B型2種のステップ端の化学活性の違いと、拡散の異方性を考慮して単層ステップ構造をもつ微傾斜面上でモデル計算を行なった。その結果、ステップフローには、化学活性と拡散の両方の異方性が利いていること、B型ステップ端が前進して成長するという観測事実は、B型ステップ端の化学活性が大きく、拡散がダイマー列方向に容易であるときに現われることを示すことができた。

第4章では結論が述べられている。

審 査 の 要 旨

Si 表面での吸着原子が、ダイマー列に平行な方向に拡散しやすいことを、第一原理による計算で示したことは、半導体表面物理における重要な寄与である。ステップフロー成長について解釈を与えたことも評価できる。表面モデルに用いた単位胞の大きさをより大きくして調べることは、将来検討すべき問題である。

よって、著者は工学博士の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。