

氏名(本籍)	エリック クワピナ チエ アバヴレ (ガーナ)			
学位の種類	博士(理学)			
学位記番号	博甲第 5952 号			
学位授与年月日	平成 23 年 12 月 31 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	数理物質科学研究科			
学位論文題目	First-principle study of atomic and electronic structures of 3C-SiC(111)/Si(110) interfaces (第一原理計算による 3C-SiC (111) /Si (110) 界面の原子構造と電子状態)			
主査	筑波大学教授	理学博士	白石 賢二	
副査	筑波大学教授	工学博士	初貝 安弘	
副査	筑波大学教授	工学博士	重川 秀美	
副査	筑波大学教授	博士(理学)	岡田 晋	

論文の内容の要旨

SiC は大きなバンドギャップを有する半導体で、多くの結晶相を有することが知られている。比較的大きなバンドギャップと化学的不活性して熱的安定性から、SiC はパワーエレクトロニクス材料の候補として注目を集めている。従って、多くの実験的な研究が SiC に対してなされつつ有るのが現状である。しかしながら、このような努力にも関わらず、SiC の産業的な応用は十分になされていると言えない状況である。産業応用を難しくしている一つの大きな原因として、単結晶 SiC の大面積合成が困難であることがあげられる。種々の半導体基板上におけるヘテロエピタキシャル成長は、今日の半導体テクノロジーを支える重要な基盤技術である。今日、SiC の異種物質表面におけるヘテロエピタキシャル成長は大面積単結晶実現の唯一無比の手法であると考えられている。これまでに、Si 上において 3C-SiC もしくは β -SiC のエピタキシャル成長が報告されている。しかしながら、基板である Si(110) 表面と 3C-SiC(111) 表面の間には 20% の格子不整合が存在し、これまでに知られている、ヘテロエピタキシャル成長系の界面構造と全く異なる原子スケールの構造を有する可能性が期待される。また、このような界面構造が誘起する界面電子物性も重要な問題の一つである。

そこで、本研究では、3C-SiC(111)/Si(110) 界面の安定な原子構造を第一原理電子状態計算の手法を用いて世界に先駆けて理論的に予言し、Si 上における SiC のエピタキシャルな成長の素過程の提示を行った。前述のように、Si(110) 表面と 3C-SiC と呼ばれる立方晶 SiC の (111) の間には大凡 20% の格子不整合が存在することが知られている。しかしながら、3C-SiC(111) と Si(110) の両表面に対して、適当な相対配向の下、面相方向における長周期格子ベクトルを導入すると、両者の間の不整合性は著しく減ぜられ、最終的に 1% 以下となる。また、3C-SiC(111) 表面は、Si と C の原子層から構築されているため、Si 暴露表面、C 暴露表面の 2 つの表面を考え、それらと Si 表面の間の界面構造を考えた。この構造モデルの下で、界面安定構造の探索を行った結果、Si-Si 界面、Si-C 界面に対してそれぞれ 2 種類の安定な界面構造の存在を見いだした。基底状態たる構造は他の準安定構造に比べて、1eV 程度安定であることが明らかになった。また、準安定状態を与える構造は、計算に用いた積層方向のスラブ厚に強く依存することが明らかになった。これは、用い

たモデルが準安定構造の構造を議論するには十分な精度を与えないことを示唆している。従って、それらのうち、基底状態である構造に関して、詳細な原子構造と電子構造の解析を行った。その結果、界面における原子構造が界面における原子密度の不整合性から、非飽和結合を有する Si 原子が Si 結晶最外層に存在し、この原子の存在により、界面は原子スケールで構造変調を受けることが明らかになった。また、同種界面と異種原子界面を比較したところ、同種原子界面、すなわち Si-Si 界面のほうがエネルギー的に安定であることが明らかになった。電子構造的には、安定構造において、非飽和結合を Si スラブ中の原子が有するにもかかわらず、Si-Si 界面、Si-C 界面共に、半導体的な電子物性を示すことが明らかになった。この半導体的な界面電子構造の起源は、非飽和結合によるダングリングボンドが近接の非飽和結合に起因するダングリングボンドと弱く結合状態を形成していることによるものであることが明らかになった。また、この結合状態形成、さらには有限ギャップの形成は系の安定かに大きく寄与するものである。すなわち、電子構造の観点からも得られた構造は物理的に妥当な構造であることが示された。

審 査 の 結 果 の 要 旨

本論文は、密度汎関数理論の手法を用いて、Si/SiC 界面の安定な原子構造の探索をエネルギー論と電子状態を基にまとめたものである。Si/SiC 界面に関する理論研究は本研究が世界初の試みであり、他に類例のないものである。とりわけ、当該界面における界面形状が、界面を形成する両者の表面内原子密度差に起因する構造緩和に伴う原子レベルでの揺らぎを有することが本論文で示された。この結果は、対象系の計算規模が大規模であるため、実空間密度汎関数法 (RSDFT) コードを用いることに世界に先駆けて実施され、提示されたものであり、高く評価できる。さらに、現在、実験的に生成が試みられている Si 上の SiC ヘテロエピタキシャル成長の成長機構の解明と、工業的に望まれている大面積を有する SiC 単結晶合成の実現への指針を併せて提示した点においても十分評価に値するものである。以上のように新規に見いだされた計算結果が十分に議論され、本論文は博士 (理学) に相当するものである。

平成 23 年 11 月 14 日、数理物質科学研究科学学位論文審査委員会において審査委員の全員出席のもと、著者に論文について説明を求め、関連事項につき質疑応答を行った。その結果、審査委員全員によって、合格と判定された。

上記の論文審査ならびに最終試験の結果に基づき、著者は博士 (理学) の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。