The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	半導体材料の結晶成長中における成長層の形成メカニズムに関する研究
Author(s)	小林, 泰典
Citation	大阪大学, 2011, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/58315
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

【74】

氏　　名	小　林　泰　典（こ　ばやし　やす　のり）
博士の専攻分野の名称	博　士（工　学）
学　位　記　番　号	第　２４５５９　号
学位授与年月日	平成23年３月25日
学位授与の要件	学位規則第４条第１項該当 工学研究科知能・機能創成工学専攻
学　位　論　文　名	**半導体材料の結晶成長中における成長層の形成メカニズムに関する研究**
論　文　審　査　委　員	（主査） 教　授　中谷　彰宏 （副査） 教　授　南埜　宜俊　　教　授　安田　秀幸　　准教授　吉矢　真人 教　授　浅田　　稔　　教　授　菅沼　克昭　　教　授　平田　勝弘

論文内容の要旨

本論文は、分子動力学(Molecular Dynamics; MD)法を用いて、短波長発光デバイスを作製するための半導体材料として注目を集めている窒化ガリウム(GaN)の分子線エピタキシー(Molecular Beam Epitaxy; MBE)法による結晶成長シミュレーションに関する研究結果をまとめたものである。

本論文は５章からなる。

第１章では、研究の背景として、半導体デバイスの産業における重要性を述べ、その材料である窒化ガリウムへの注目度の高さと、結晶品質の向上が重要であることを述べた。そして、現状の結晶成長に関する研究の概略について述べ、その上で、本研究の目的、および意義を述べた。

第２章では、本研究で主に用いる解析手法であるMD法の概要を述べ、計算の効率化、GaNを表現するためにTersoffポテンシャルを用いることを述べた。また、本研究で用いるその他の解析手法、解析データの数値化・定量化の方法、解析モデルと解析条件を述べた。最後に、ポテンシャル、およびモデルの妥当性を示した。

第３章では、GaN基板上へのGaNの成長を考え、基板の材料と照射原子の相違による格子定数の違いの影響を除いた理想化された条件下でシミュレーションを行った。そして、基板温度は成長層の結晶性を決定付ける因子であり、低温条件下では成長層がアモルファス化するのに対し、高温条件下では層ごとに結晶層が形成されることが分かった。また、成長の様子を表す指標として、成長表面における吸着原子の局所密度の分散値を導入した。この値とその時間変化から、低温であるほど付着成長が、高温であるほど２次元的成長が支配的であることが分かった。

第４章では、基板材料と成長層材料の格子定数の相違による影響を、ひずみを導入したGaN基板上へのGaNの成長シミュレーションにより調べた。基板温度と成長層の結晶性について論じることに加えて、ひずみが成長層の結晶性にどのように影響を与えるかを論じた。NEB 法による解析からは、島の縁に吸着するための活性化エネルギーは、ひずみを導入した基板上で大きく、活性化エネルギーを超えて島の縁に吸着できる原子がほぼないことが分かった。また、拡散係数を評価したところ、無ひずみ基板上における拡散係数の方が大きいことが分かった。これにより、無ひずみ基板上の方が、吸着原子の易動度が大きく、成長層の形成が、より２ 次元的であることが説明できた。また、２次元成長領域においてはウルツ鉱構造をとり、一方で、島と島の間は粒界となり乱雑な構造をとるので、無ひずみ基板上の方が結晶性が高いことが分かった。

第５章では、第４章までで得られた結果の総括を行い、今後の展望を述べた。

論文審査の結果の要旨

窒化ガリウム(GaN)は、その産業における重要性から、より品質の良い結晶の創製に向けた知識の獲得が期待されている。本論文は、GaN の分子線エピタキシー(Molecular Beam Epitaxy; MBE)法による結晶成長における結晶品質の向上のための基礎的知見を得ることを目的として、分子動力学シミュレーション(Molecular Dynamics; MD)によって結晶成長過程および結晶構造の解析を行った成果をまとめたものであり、得られた知見を要約すると以下のとおりである。

1．種々の基板温度における MBE 成長の MD シミュレーションを行い、生成される結晶構造を詳細に解析している。その結果から、低温時には成長層がアモルファス化するが、高温時には層ごとに成長する傾向が強くなることを示し、基板温度が成長層の結晶性を決定する主たる要因の一つであることを明らかにしている。

2．成長層の結晶構造を特徴付けるパラメータとして層内原子の局所密度の分散値による定量化を提案している。このパラメータを用いた解析により、低温成長時には表面に原子が無秩序に付着するが、高温成長時には表面拡散が支配的になり島状構造が形成されることを明らかにしている。さらに、基板温度が高温であるほど、より大きな面積をもつ少数の島状構造が構成されることを明らかにしている。これらの結果により、基板温度によって、島状構造の２次元的な成長の速度と、島状構造の上にさらに新たな島状構造が形成される３次元的な成長の速度が変化し、結果として成長層の全体の形態に影響を与えることを明らかにしている。

3．ヘテロ接合の幾何学的要因が結晶成長に及ぼす影響を解明するために、予ひずみを導入した基板上の結晶成長解析を行っている。その結果、予ひずみを導入した基板上では多数の小さな島状構造が積み重なって３次元的な成長が見られることを明らかにしている。さらに、基板上での拡散原子の平均二乗変位から拡散係数を評価した結果、基板の予ひずみが大きいほど拡散係数が小さくなることを明らかしている。そして、基板に予ひずみを導入した場合、原子の拡散が起こりにくくなることにより、吸着原子がテラスに移動するまでに他の吸着原子と共に島状構造を形成する頻度が大きくなり、結果として大きな島状構造が形成されにくくなること、さらに、不整合界面が導入される可能性が大きくなることを明らかにしている。

以上のように、本論文は、MBE 成長における基板の温度条件と幾何学的条件の違いによる成長層の構造の形成メカニズムの違いを、MD シミュレーションによって原子運動の素過程から解析し、シミュレーションを用いた解析の有効性を示すとともに、半導体材料の設計の指針に結びつく結論を導いており、機械工学および材料工学に貢献するところは大きい。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。