

審査の結果の要旨

氏名 孫 瑜 (そん ゆ)

本論文では、原子レベルの解析手法である反応経路解析を使って、銅並びに 3C-SiC における転位生成の活性化エネルギー及び活性化体積の応力依存性を調べ、さらに、3C-SiC ウェーハ製造プロセスにおける SiC 基板の反り発生及び積層欠陥発生・消滅メカニズムの解明への応用を試みたものである。

第 1 章では、序論として、本論文で扱う銅と 3C-SiC の転位生成に関する学術的背景として、それぞれの転位の特性、単元系と二元系における転位の特性の違いについて述べられている。また、転位生成のような分子動力学では解析不能である非常に遅い現象への、本論文で適用する反応経路解析の有効性について述べられている。

第 2 章では、本研究で用いている分子動力学の手法及び反応経路解析の詳細な手法について、説明がなされている。

第 3 章では、角部からの銅の転位生成の反応経路解析により、 30° 部分転位と 90° 部分転位の生成の活性化エネルギーの応力依存性および鞍点における転位核の原子形態について求めている。結果、 90° 部分転位が 30° 部分転位より活性化エネルギーが低いことを示した。これは、 90° 転位がパイエルスエネルギーが低いことに起因すると考えられる。また、 90° 部分転位はおおよそ等方的な転位ループが生成するのに対して、 30° 部分転位はパイエルスエネルギーが異なるらせん成分と刃状成分を転位ループの両端に含むため、生成した転位核の形状に異方性が見られることがわかった。また、この異方性が活性化エネルギーを高くしていることがわかった。このような結果は、連続体力学ベースの転位論では見出せず、原子レベルのシミュレーションによって初めてわかったことである。

第 4 章では、角部からの銅の転位生成において確立した反応経路解析の手法を 3C-SiC に応用し、二元系特有の二つの転位芯形状 (Si-core, C-core) の特徴の違いを明らかにした。活性化エネルギーの応力依存性を調べた結果、Si-core のほうが C-core と比較して、活性化エネルギーが低く、より低い応力で転位が生成することがわかった。これは C-core の転位芯における C-C 結合の強さに起因するものと考えられる。

Meyer-Neldel 則に基づき、活性化自由エネルギーの考察により、低温域においては、活性化自由エネルギーが低い Si-core の転位が生成するが、高温域においては、高応力で C-core の転位が生成する可能性があることが示され、実験結果を定性的に説明することができた。また、表面ステップから発生する 3C-SiC

の転位の反応経路解析を行い、応力場の違いによる発生条件の違いについて論じた。結果、ステップ起因の転位の生成の活性化エネルギーが角部からの生成のエネルギーより小さくなることがわかった。

第5章では、3C-SiC 基板製造プロセスに貢献するため研究が述べられている。最初に、発生している応力を知るために、基板の反り解析による真性応力の算出を行った。成長初期には炭化プロセスに起因する圧縮応力が発生し、その後の真性応力は膜厚に依存し、基板となる Si との界面近くが小さく、界面から離れると大きくなることがわかった。これは、積層欠陥密度の変化に起因するものであり、積層欠陥がより多く消滅している結晶方位でのみ強く生じることがわかった。

次に、第4章の結果により、SiC ウェーハ製造プロセスの部分転位起因の積層欠陥生成・消滅メカニズムの解明を試みた。結果、発生しにくく移動度が低い C-core の部分転位に起因して発生する積層欠陥 (SF_c) が、自己消滅及び積層欠陥同士の衝突による停止を起こし、密度が低くなると推測される。一方、Si-core の部分転位に起因する積層欠陥 (SF_{si}) は消滅や停止が起こりにくく、密度が高くなることが推測される。このメカニズムは、Si-core 起因の SF_{si} が最終的に支配的に残留するという実験結果を定性的に説明することができ、3C-SiC 基板の積層欠陥密度制御技術への指針を提供することが出来た。

第6章では、結論と研究の展望を述べた。加速分子動力学法の適用による活性化自由エネルギーの算出が課題である。

これらの成果によって、本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。