

審 査 の 結 果 の 要 旨

氏 名 楊 晶

研究題目： Reaction Pathway Analysis for the Mobility of Partial Dislocation in 3C-SiC and Shuffle-set Perfect Dislocation in Silicon

(3C-SiCの部分転位とシリコンのシャフルセット完全転位の移動度に関する反応経路解析)

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、3C-SiCにおけるショックレー部分転位及びシリコンにおけるシャフルセット完全転位の移動度を調べたものである。転位の移動度に関連するキンク生成及びキンク移動の活性化エネルギーの応力依存性を、分子動力学をベースとした反応経路解析により解析し、単結晶 3C-SiC 中で観察される転位の形態の理論的な説明が可能になった。また、今まであまり注目されてこなかった低温で発生するシリコンのシャフルセット転位の特異な転位の移動過程及び高温でのシャフルセット転位のグライドセット転位への遷移についてのメカニズムの解明を行った。具体的内容は以下の通りである。

第1章では、3C-SiC 及びシリコン中の転位問題の学術的な意義、本論文で使用する転位生成のような非常に遅い現象への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、分子動力学解析、用いる原子間ポテンシャルの詳細、反応経路解析手法の理論（共役勾配法によるエネルギー緩和とナッチドスティックバンド法）について述べられている。

第3章では、3C-SiC の 30° 及び 90° 部分転位について、Si-core と C-core の二種類の転位芯構造の転位についてのキンクの生成及び移動の活性化エネルギーとその応力依存性を求めた。そして、両部分転位において、Si-core がより移動度が高いこと、 90° 転位が 30° 部分転位より移動度が高い結果を得た。すなわち、 90° 部分転位 (Si-core) $>$ 90° 部分転位 (C-core) $>$ 30° 部分転位 (Si-core) $>$ 30° 部分転位 (C-core) の順序となった。また、 30° 部分転位は、左側キンクが右側キンクに比べ移動度が大きく低いことがわかった。この結果は、実験と一致するが、先行研究の第一原理計算では C-core の移動度の方が高

く、一致しない。これは、第一原理計算のモデルが小さいため、適切に転位の長距離弾性相互作用が含まれていないためと考えられる。

また、反応経路のエネルギー曲面の形状の違いから、 30° 転位は直線的な形状を、 90° 転位はジグザグな形状になることを予測し、実験結果をうまく説明できることがわかった。また、結晶中に存在する積層欠陥が台形型か三角形であることを予測し、実験との一致をみた。

第 4 章では、低温・高応力で生成するとされるシリコンのシャフルセット完全転位の移動度を調べた。低応力域（ひずみ 0～5%）で安定な S1 型の転位芯と高応力域（ひずみ 5～17.5%）で安定な S2 型の転位芯を持つシャフルセット 60° 転位のキンク生成及び移動の活性化エネルギーの応力依存性を得た。結果、S1 転位は高応力域（ひずみ 5～17.5%）で S2 転位に変化することがわかった。S2 型の転位は、高応力にもかかわらず移動の活性化エネルギーが高く、低温では不動化することが予測される。また、右側キンクがグライドセット面とシャフルセット目の両方の結合の組換えで 1eV 以上と高い活性化エネルギーを乗り越えて移動することがわかった。よって、高温では、このキンクの移動がシャフルセット転位—グライドセット転位の遷移のメカニズムとなっている可能性を提示した。

第 5 章では、結論と研究の展望を述べた。

付録 A として、別途、共同研究で行われた AlN, GaN 薄膜応力解析の結果が示されている。成膜時に数百 MPa 以上の高い応力が生じていることを実験的に示し、本研究が対象とする応力レベルの検討が必要であることがわかる。

付録 B として、計算の Verification and Validation（検証と妥当性確認）の検討結果を示している。モデルサイズ・時間ステップ等の計算条件が結果に及ぼす影響について検討し、本研究の結果が妥当であることを示している。

以上、博士論文として十分な成果があり、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。