

論文審査の結果の要旨および担当者

報告番号	※ 甲 第 14053 号
------	---------------

氏 名 刘 欣博

論 文 題 目

Multiscale numerical investigation on step dynamics during
solution growth of 4H-SiC
(4H-SiCの溶液成長のステップダイナミクスに関するマルチスケール
数値解析研究)

論文審査担当者

主査	名古屋大学	未来材料・システム研 究所	教授	宇治原 徹
委員	名古屋大学	工学研究科	教授	小山 敏幸
委員	名古屋大学	工学研究科	教授	君塚 肇
委員	金沢大学	総合メディア基盤セン ター	教授	佐藤 正英
委員	名古屋大学	情報学研究科	教授	武田 一哉

論文審査の結果の要旨

刘 欣博君提出の論文「Multiscale numerical investigation on step dynamics during solution growth of 4H-SiC」は、SiC結晶の溶液成長におけるステップバンチングに与える影響を明らかにするためにマルチスケールの数値解析の手法を開発し、結晶成長の反応定数と溶液内の溶質の拡散係数をパラメータとして、そのメカニズムを明らかにしている。各章の概要は以下の通りである。

第1章では、次世代パワーデバイス用半導体材料として期待される4H-SiC（炭化ケイ素）の物性の観点からの重要性を述べたのちに、高品質結晶を得る手法としてTop-Seeded solution growth(TSSG)法が適していることを述べている。TSSG法における結晶成長では結晶表面のマクロステップの挙動に伴う転位変換現象を応用することで転位の少ないSiC結晶を得ることができ、ステップバンチングのメカニズムを系統的に理解することの重要性を述べ、マルチスケールの数値解析により、SiC結晶の溶液成長におけるステップバンチングに影響を与える要因について考察することを目的とすることを述べている。

第2章では、TSSG法により4H-SiCの成長実験を行い、ステップバンチングと転位の挙動の関係について調べている。結晶成長表面に形成された不均一なステップ高さのマクロステップを詳細に調べたところ、転位の変換が生じたところと生じないところが存在することがわかり、ステップ高さがその不均一性に影響していることを明らかにした。さらに、この現象を明らかにするために、熱流体解析によるマクロスケールな数値シミュレーションを行ったところ、ステップに対する溶液の流れの向きにより、ステップ高さの発展の仕方が異なることを明らかにした。

第3章では、ステップバンチングの時間発展を定量的に研究するために、メソスケールでの物質輸送とステップカイネティクスを結合しメソスケールのシミュレーションモデルを構築、その結果、溶液流が存在する場合のステップバンチングの挙動を説明することができ、さらに溶質が、ステップへの取り込みと輸送が一体となってステップバンチングの進行を決定していることを明らかにした。次に、溶媒の物性は物質輸送とステップカイネティクスの関係を調べたところ、無次元ダムケーラー数で整理できることを明らかにし、実験結果と比較することでダムケーラー数と表面平坦性や成長速度との関係を表す相図を示した。

第4章では、拡散係数とステップカイネティクス係数の両方の観点から、モンテカルロ法を用いて、マイクロスケールでのステップカイネティクスの数値計算を行い、 $\langle 1-100 \rangle$ 方向と $\langle 11-20 \rangle$ 方向のステップについて、温度、過飽和度、不純物の有無を変えてステップカイネティクス係数の見積もりを行った。また、結晶成長界面のモフォロジーに大きな影響を与えるアルミニウム様の不純物をシミュレーションに導入し、ステップバンチングに与える影響を調べた。その結果、Si面では、テラスとステップエッジの両方で取り込みが生じ、テラスでのラングミュアの吸着が不純物によるステップバンチングの起源となり、C面ではステップの取り込みが実現されている。ステップエッジでの不純物吸着によるステップ移動の抑制が、C面におけるステップバンチングを抑制している可能性を示唆した。

第5章では、データサイエンスにおける本研究の位置づけについて述べた。

第6章では、本研究の結論を与えている。

以上のように本論文ではTSSG法によるSiC結晶成長において結晶品質において重要な役割を果たすステップバンチング挙動のメカニズム解明およびその制御法について、カイネティクス係数および拡散係数の観点から数値計算によって明らかにしている。これらの結果は、高品質SiC結晶成長技術を実現するために極めて重要であり、工学の発展に寄与するところが大きいと判断できる。よって、本論文の提出者である刘 欣博君は博士（工学）の学位を受けるに十分な資格があると判断した。