

Dynamic Behavior of Grown Surface and Interface, and Atomic Scale Simulation

成長表面・界面の動的挙動と 原子スケールシミュレーション

プロジェクトリーダー 入 澤 寿 美

学習院大学 計算機センター 助教授



図1 理論グループが遠隔地から利用するワークステーション群



図2 原子間顕微鏡 (AFM) の測定風景

1. 研究の目的

物質(材料)は原子・分子レベルでその構造が制御されることにより、従来から利用されているバルクの性質から量子的効果が加わった新機能・高機能な新しい物性を発揮するようになる。この機能を有する物質の創製のためには、成長フロントである結晶表面での現象、(1)原子・分子の結晶表面への吸着、表面からの離脱、表面上での原子・分子の移動それに伴う表面構造の再構成、(2)それらが組み合わされた動的な「核形成」過程、欠陥や不純物の混入過程、(3)それに続く「ステップの運動」を理解し、(4)結晶表面のメソスコピック・構造(パターン)形成を制御する必要がある。これらを総合的に理解するために本研究では、量子力学の第一原理に立脚した計算結果を基にモデル化を行い、表面構造を含めて原子・分子の協同現象を理解するための大規模なシミュレーションを行って、結晶表面のメソスコピック・構造形成を支配する一般的な原理の解明と、実験結果を原子スケールで理解できるようになることを目的とする。

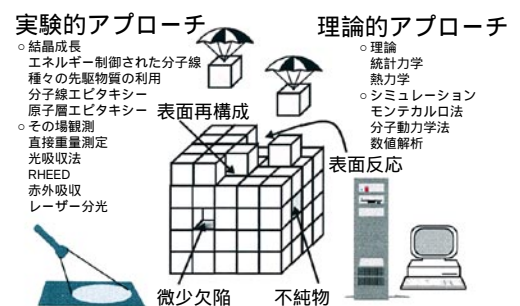


図3 本研究の概念図。理論および実験的アプローチにより、結晶表面の素過程、結晶内部の微小欠陥、不純物などの生成機構を明らかにする。

2. 研究の内容

結晶成長は結晶最表面で起こる原料分子の「吸着」および「拡散」、それに続く「反応」および「脱離」の各々の素過程により成り立っている。このため、結晶成長機構の解明のためには各素過程を原子・分子レベルで解明しなくてはならない。さらに、完全結晶の成長のためには結晶中の微小欠陥や超微量不純物の生成過程の解明が不可欠である。本プロジェクトでは、微小欠陥の生成や結晶組成も含んだ結晶成長機構の解明に焦点をあて、バルク結晶およびエピタキシャル結晶に対して、「結晶成長」、「成長結晶の原子・分子レベルの分析」および「原子・分子レベルのその場測定」を行っている実験グループと、統計力学および熱力学に基礎を置き、上記現象の理論的解明(計算機シミュレーションを含む) を目指している理論グループとがある。

(1) 理論解析

現象論的方法ならびに統計力学的手法で結晶成長の諸現象を理論的に研究し、結晶表面での諸過程の理解と結晶表面のメソスコピック・構造形成を支配する一般的な原理の解明を行っている。すなわち、数値繰り込み群計算等の新しい考え方に立脚した固・気・固・液の平衡状態のモデルによる厳密な理解と現実への適用、多成分系の核形成(成長初期過程) 理論の確立、ステップの運動およびそれに続く面の運動に関する安定性の理論解析によるパターン形成を支配する一般方程式の構築、実験に促したシステムのモデル化等の研究を進めている。これらの理論的考察は、それを裏づける可視化されたシミュレーション(図4) が不可欠で、「計算機実験のその場観察」とでも言うべき高速シミュレーション・システムの開発により、現象のより深い理解が期待できる。

(2) 成長導入欠陥解析

CZ法で作成されたシリコンバルク結晶が室温まで冷却されるまでに導入される二次欠陥の評価法を開発し、評価を行い、二次欠陥の発生機構を解明し、固液界面の点欠陥の挙動を再現する。また、酸化膜分離シリコン基板(SOI) において同様の評価に基づきシリコン・酸化膜界面での原子の挙動を再現する。評価法として赤外散乱法やX線準禁制反射法、SOIの評価法として紫外線フォトルミネッセンス法、点欠陥の評価法として陽電子消滅法や赤外分光法をそれぞれ主に用いる。赤外散乱法、紫外線フォトルミネッセンス法は共に担当者が世界に先がけて開発した方法である。また、理論面では非平衡を含む熱力学の解析を行う。

(3) エピタキシャル成長

エピタキシャル成長では、超高真空環境で構成原料そのものの分子線及びそのエネルギーを制御した分子線を用いた分子線エピタキシー法(MBE) 及び常圧で水素キャリアガスが多量に存在する通常の気相成長条件で行う、ハロゲン輸送原子層エピタキシー法(ALE) を用いる。特に、本プロジェクトで用いる「グラヴィメトリックその場測定装置」をALE装置に組み込んだ装置は、結晶成長中に単原子・単分子層レベルで重量の測定が可能で、ALE成長により分離された各素過程での結晶最表面に吸着あるいは成長した原子・分子を直接その場測定することができる(感度: 約0.025 μ g(マイクログラム))。図5にGaAsのALE成長中のその場測定結果を示す。図から、0.05分子層以下の精度で表面の分析が可能であることがわかり、表面からのAs脱離によりAs表面被覆率が減少するとともに、一定の被覆率で安定な表面が存在することが明らかになった。これらの安定化面は、従来、超高真空環境でのみ観測され表面再構成構造として知られていたが、直接的で定量的な測定は初めてである。さらに、従来、常圧あるいは低圧での測定法が無いために測定が困難であった気相成長条件においても、この方法により測定できることが明らかになった。

3. 研究の体制

期 間: 1997年7月～2002年3月

構 成: プロジェクトリーダー: 入沢寿美(学習院大学計算機センター・助教授)

コアメンバー: 3名、研究協力者: 15名(内ポストドク3名)

実施場所: 学習院大学計算機センター 豊島区目白1-5-1

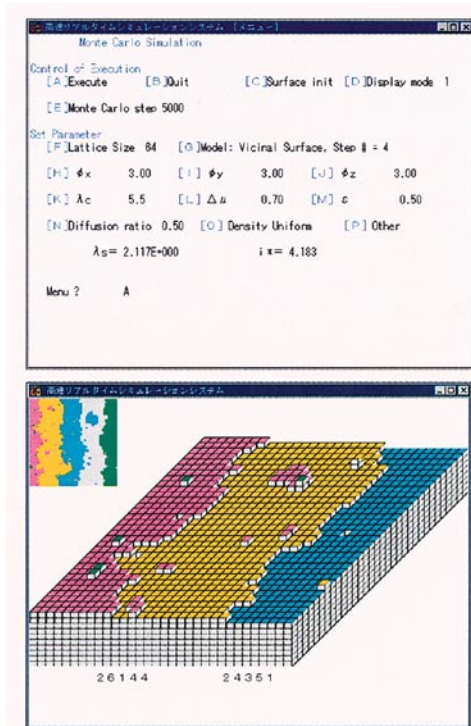


図4 希薄な環境からの結晶成長シミュレーションを制御するメニュー画面と成長中の結晶表面。一つの立方体を原子に見立てたもの。

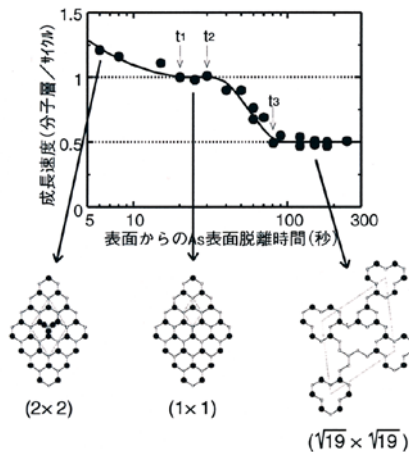


図5 原子レベル重量その場測定により定量的に明らかにされた表面のAs被覆率。