

氏 名	市 村 正 也 <small>いちむらまさや</small>
学位の種類	工 学 博 士
学位記番号	工 博 第 1021 号
学位授与の日付	昭 和 63 年 3 月 23 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 5 条 第 1 項 該 当
研究科・専攻	工 学 研 究 科 電 気 工 学 専 攻
学位論文題目	ANALYSIS OF ATOM ARRANGEMENT IN III-V ALLOY SEMICONDUCTORS (III-V族混晶半導体中の元素配列に関する研究)
論文調査委員	(主 査) 教 授 佐 々 木 昭 夫 教 授 松 波 弘 之 教 授 藤 田 茂 夫

論 文 内 容 の 要 旨

混晶半導体は二種またはそれ以上の半導体が原子のオーダーで混合した固溶体であり、その物性定数の人為的設計が可能である。現在すでに、半導体レーザ等多方面に用いられ、今日の電子工学にとって不可欠な材料となっている。しかし、混晶半導体の基礎的な事柄の多くは未知のまま残されている。その物性に関する理解を困難にしている主な原因の一つに元素配列の不規則性（組成不規則性）がある。混晶半導体では原子が混ざった状態にあり、結晶構造の周期性の程度が低くなっている。また、それに加え原子間距離である結合長の変動（構造不規則性）も問題となる。

本研究ではIII-V族混晶半導体をその対象とし、主なIII-V族混晶を構成元素数により次のように分類している。

1. 三元混晶：(InGa) As, Ga (AsP) など。
2. (ABC) D型四元混晶：(InGaAl) As など。
3. (AB) (CD)型四元混晶：(InGa) (AsP) など。

これらに対し、次のような観点から理論的検討を加えている。

- i) 元素配列の不規則性，組成不規則性の解明。
- ii) 原子間距離の変化，構造不規則性の解明。
- iii) 以上の不規則性が物性に与える影響の解明。

本論文は7章からなっている。第1章は序論であり、研究の背景、目的について述べている。第2章から第5章は上記i), ii)の問題にあてられている。元素配列または原子配列については熱力学の手法を用い解明を試みた。すなわち、エンタルピー項とエントロピー項からなる自由エネルギーが最小となる配列を、理論的に見出した。まず、第2章において、各結合に蓄えられる歪エネルギーが混合エンタルピーの最重要な要素となっている事、また歪エネルギーの評価においては、格子緩和と格子のつながりを考慮すべき事を論じている。

続いて、第3, 4, 5章において、それぞれ上記1. 2. 3.の型の混晶について元素配列を議論している。解析の結果、元素配列は完全に乱雑なものではなく、以下に述べるような非乱雑性の存在することが示された。三元混晶と(ABC)D型四元混晶では、大きさの異なる原子が隣接しやすい。これは歪エネルギーが減少するためである。(AB)(CD)型四元混晶では、歪エネルギーに加え、結合数割合の変化に伴う結合力の変化も重要な要因となる。どちらが支配的な要因となるかは、物質により異なる。

第3, 4, 5章においては、ii)の構造不規則性をも論じている。混晶中の結合の歪は近接の結合種に影響され、同一種の結合であっても複数の異なる長さを持つ。本研究では、それらの平均を取ることににより、各結合の平均結合長を算出した。この平均を取る際に、元素の配列状態を考慮しており、これにより歪と配列の相互関連が反映される。

iii)の問題は第6章において論じており、次に示す結果を得た。超格子の安定性：各層が薄いほど歪エネルギーが減り、安定であることが示された。合金散乱移動度：配列の規則性による変化を定量的に評価した。転位の運動：配列の規則性が転位の運動を妨げる強さを算出した。以上より、元素配列が物性に大きな影響を与えることが示された。

最後に第7章の結論で、本研究で得られた成果をまとめ、今後更に検討していくべき課題を述べている。

論文審査の結果の要旨

III-V族混晶半導体は、超高速デバイス(device)、光デバイス等に広く用いられており、電子工学において非常に重要な材料である。しかし、その基本的な事項と考えられる元素配列、結合長等に関して不明な所が多く残されていた。本研究では、この問題を解明することを目的として、その微視的結晶構造について理論解析を行った。得られた結果を以下に記す。

1. III-V族混晶における構成化合物間の主な相互作用は結合の歪エネルギーと考えるべき根拠を示し、また、歪エネルギー評価の際には格子の変形および格子のコヒーレンシ(coherency)を考慮する必要があることを示した。
2. InGaAs等の三元混晶を構成する5種類の四面体の歪エネルギーを算出し、さらに、エントロピーをも考慮した熱力学計算により熱平衡状態での四面体数割合を求めた。その結果得られた元素配列では、乱雑分布状態に比べ、異種原子同士が隣合う確率の高いことが示された。
3. 三元混晶の各結合長を5種類の四面体内で計算し、その値を熱平衡状態での四面体数割合で加重平均を取ることににより、平均結合長を求めた。またInGaAs, GaAsPについては、計算値がEXAFS(extended-X-ray-absorption fine-structure)法による実験値とはほぼ一致することを確かめた。
4. InGaAlAs等の(ABC)D型四元混晶についても、三元混晶と同様の手法により四面体数割合を算出し、元素配列を議論した。その結果、熱平衡状態では大きさの異なる原子が隣接しやすいことが示された。三元混晶と異なり、このことは、異種原子同士の隣接確率の増加を必ずしも意味しない。
5. (ABC)D型四元混晶の平均結合長を三元混晶におけると同様の手法で算出した。
6. InGaAsP等の(AB)(CD)型四元混晶については、歪エネルギーに加え、結合数割合の変化に伴う

結合エネルギーの変化をも考慮し、種々の混晶系において熱平衡状態の結合数割合を求めた。また、歪エネルギーと結合長の関係に着目し、結果の物理的意味を明らかにした。

7. (AB)(CD)型四元混晶であるInGaAsPについて、単一の単位格子内の結合長を算出した。さらに、25種類の異なる単位格子の存在を考慮して平均結合長を算出し、その組成依存性、および結合数割合との相関を明らかにした。また、EXAFS測定の結果と概ね一致することを示した。

8. 熱力学計算を応用し、三元混晶系の超格子の安定性について論じた。(100)面単原子層超格子はある温度以下で安定となり得るが、他の構造は安定とはならないことを示した。

9. 三元混晶中の元素配列が、キャリアの合金散乱移動度、および転移の易動度に及ぼす影響を定量的に評価した。いずれの場合も配列状態の比較的小さな変化が物性に大きな影響を及ぼし得ることを示した。

以上要するに、本論文はⅢ-V族混晶半導体中の元素配列を熱力学的手法により理論的に明らかにし、また各半導体中の結合長の値を算出し、さらにそれら結果と諸物性との関連を理論的に検討したものである。学術上、実際上寄与するところが多い。よって本論文は工学博士の学位論文として価値あるものと認める。

また、昭和63年2月24日論文内容とそれに関連した試問を行った結果、合格と認めた。