

氏名	稲 永 征 司		
学位の種類	博 士 (工学)		
学位記番号	工博乙第87号		
学位授与の日付	平成18年9月30日		
学位授与の条件	学位規則第4条第2項該当		
学位論文題目	Si(100)表面における水素引き抜き反応のダイナミックスと キネティクス		
論文審査委員	主 査	教 授	並 木 章
		”	山 崎 二 郎
		”	西 垣 敏
		”	岡 本 良 治

### 学位論文内容の要旨

水素原子と表面吸着水素の反応はSiプラズマCVDにおいて本質的な役割を演じている。しかしながら、その反応のミクロな立場からの理解は充分ではない。シリコン表面での水素引き抜き反応では吸着水素として重水素でラベルすることで気相原子と区別する。この時吸着D原子のHによる引き抜き反応には、(1)直接引き抜き反応： $H + D/Si(100) \rightarrow HD$  (ABS反応と略記)と、(2)間接的引き抜き反応： $H + D/Si(100) \rightarrow D_2$  (AID反応と略記)がある。稲永氏は、表面科学的な手法とシミュレーションにより、ABS及びAID反応をキネティクスとダイナミックスの立場から解明し、本論文を提出した。

序論では、論文の主題を理解するために、Si表面での水素吸着様式を概観し、さらにこれまでの吸着水素引き抜き反応の歴史と到達点を簡潔にまとめている。

第2章では実験に用いた水素原子線と表面反応分析装置、及び吸着水素引き抜き反応のシミュレーション方法を説明している。

第3章ではABS及びAID反応のダイナミックスを知るために、脱離分子の角度分布を実験的に求め、結果をシミュレーションにより再現して見せている。ABS反応で生ずるHD分子の角度分布は表面垂直方向にピークを示し、ほぼ $\cos^2\theta$ の曲線にのることが実験的に明らかにされた。LEPSポテンシャルを用いたダイナミックシミュレーションにより、HD分子の脱離は垂直軸から $23^\circ$ 傾いたSi-Dの結合方向に起こることが示され、実験結果は異なるSi-D方向の重ね合わせとして見かけ上垂直方向の脱離となっている事を証明した。

第4章ではパルスH原子ビームを用いたABSとAID脱離反応の過渡的現象について述べている。ABS反応はパルスHビームに追従した瞬時的脱離であることが実験的に示され、ABS反応が直接的な引き抜き反応であることが確認された。これに対してAID反応では、Hパルスに即座に応答する速い反応と、Hが遮断されても起こる遅い反応があることを示した。速いAID反応は $(3 \times 1)^{-2}$ 水素化Si領域でHの吸着が起点となって起こり、又、遅いAID反応は水素吸着により過剰に生成された $(3 \times 1)^{-2}$ 水素化Si相の消滅に付随した反応であると理解された。

第5章ではSi(100)表面へのH取り込み過程に対してレート方程式による解析が行われた。H照射中の表面へのH取り込み過程にはABSやAID反応による吸着水素のロス過程だけでなく熱脱離も含まれ、吸着と全てのロス過程を取り込んだレート方程式が提案された。レート方程式を数値的に解くことにより、H照射時間の関数として表面水素被覆度を求めた。計算結果はABS及びAID反応の実験結果も良く再現した。又、この章の最後では、プラズマCVD法によるa-Si膜のダングリングボンド密度は500-600Kで最小となり、他方おなじ温度域でAID反応は最大となり、両者の間には明確な反相関の関連が有ることが示された。これにより2水素化Siの表面生成がプラズマCVDによるSiの膜質を左右していることが示唆された。

## 学位論文審査の結果の要旨

Hによる吸着Dの引き抜き反応に対して稲永氏が示したことは、従来述べられてきた単純な気相水素と吸着水素の衝突反応ではなく、気相水素原子は一旦Si表面に吸着し、その後のエネルギー緩和過程ないしは局所的なH/Si相の熱力学的不安定性に起因した分子脱離である事を疑義無く示したことである。この意味で、稲永氏のこの分野への貢献は大変大きいものがある。又、水素引き抜きの素反応過程が明確にされたことで、プラズマCVD過程のシミュレーションに不可欠な知見を提供した事は工学的にその意義は大きく、提出された論文が博士(工学)の学位論文として充分であると認められた。

なお、審査委員並びに公聴会出席者からは、熱脱離、Si(100)表面のダブルドメイン構造、LEPSポテンシャル、プラズマCVDでのAID反応の役割、本論文の意義などについての質問がなされたが、いずれについても適切な回答がなされた。

外国語の評価については、英語による論文が多数あることよりその実力は充分であると判断した。又、ドイツ語に関しては、ドイツ語で記載された論文の和訳によりその能力を確認した。

以上の結果から審査委員会は論文提出者稲永氏が最終試験に合格したものと判断した。