

Title	鉄シリサイド半導体におけるひずみによるバンド構造制御に関する研究
Author(s)	野田, 慶一
Citation	大阪大学, 2013, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/27547">https://hdl.handle.net/11094/27547</a>
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

氏名	野田 慶一
博士の専攻分野の名称	博士 (工学)
学位記番号	第 26197 号
学位授与年月日	平成 25 年 3 月 25 日
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当 工学研究科マテリアル生産科学専攻
学位論文名	鉄シリサイド半導体におけるひずみによるバンド構造制御に関する研究
論文審査委員	(主査) 教授 藤原 康文 (副査) 教授 掛下 知行 教授 山下 弘巳 鹿児島大学大学院理工学研究科准教授 寺井 慶和

## 論文内容の要旨

半導体ベータ鉄シリサイド( $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>)はバンドギャップ付近の状態密度がFeの3d電子に支配されているため、ひずみとバンド構造に強い相関が存在するという特徴を有している。これまでに、第一原理計算により、ひずみがないバルク単結晶は間接遷移型半導体であるのに対し、Si基板上 $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>薄膜は、Si基板と $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>のヘテロ界面で生じるひずみによりバンド構造が変化し、直接遷移化する可能性が示唆されている。しかし、実験的にはSi基板上 $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>の遷移型は明らかにされておらず、ひずみによるバンド構造変化も実証されていない。本論文は、 $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>におけるひずみによるバンド構造制御を検証することを目的とし、実験および理論的視点からそのひずみ制御の実現可能性についてまとめたものである。本論文は以下に示す8章からなっている。

第1章は序論であり、本研究の背景および目的と意義を述べた。

第2章では、本研究の研究対象である $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>についてその特徴などを詳細に述べた。 $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>はひずみとバンド構造の相関に関して数多くの第一原理計算による報告が存在しており、これらは本研究のもととなるものである。本章ではこれらの計算結果についても詳細を述べた。

第3章では、試料作製に用いた分子線エピタキシー装置や基板洗浄方法など、試料作製に関わる事柄について詳細に述べた。また、試料評価方法について原理等を述べた。

第4章では、Si基板上への $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>成長における最適成長条件の探索を行った。その結果、既報告よりも良好な配向性を持つ試料の作製に成功した。

第5章では、Si基板上 $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>エピタキシャル膜について、ひずみとバンド構造変化の検証を行った。バルク単結晶試料とSi基板上 $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>エピタキシャル膜の比較、および、異なるSi/ $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>ヘテロ界面数を持つ試料の直接遷移エネルギーを比較することにより、ヘテロ界面に起因したひずみが $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>のバンド構造に影響を及ぼすことを実証することに成功した。また、Si基板上 $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>エピタキシャル膜に対して、熱処理や成長条件により格子変形を導入したところ、その格子変形に対応して直接遷移エネルギーが減少すること、格子変形と $E_g$ は同一系統上でシフトすることが明らかになり、これまで第一原理計算で理論面のみで示されていたひずみとバンド構造の相関を初めて実験的に実証することに成功した。また、 $a$ 軸格子定数をあと0.21%程度伸長させることが出来れば直接遷移化に至る可能性を示す知見が得られた。

第6章では、第5章で得られた格子変形の値を用いて、実際の試料に即した条件で第一原理計算を行い、 $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>

のバンド構造に対するひずみの効果の更なる検証を行った。その結果、 $a$ 軸と $b$ 軸の伸長が $E_g$ 減少に寄与すること、また、Fe-Fe原子間距離の伸長が $E_g$ 減少に寄与する可能性を明らかにした。

第7章では、Si基板上 $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>エピタキシャル膜に対して第三元素添加によりひずみ制御を行うことを目指した。AlとGeについて、 $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>エピタキシャル膜へ添加可能なこと、また、添加により格子定数が増加することを実証でき、今後の $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>エピタキシャル膜ひずみ制御技術の確立に向けて重要な指針が得られた。

第8章では、本論文を総括した。

## 論文審査の結果の要旨

半導体ベータ鉄シリサイド( $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>)はバンドギャップ付近の状態密度がFeの3d電子に支配されているため、ひずみとバンド構造に強い相関が存在するという特徴を有している。これまでに、第一原理計算により、ひずみがないバルク単結晶は間接遷移型半導体であるのに対し、Si基板上 $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>薄膜は、Si基板と $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>のヘテロ界面で生じるひずみによりバンド構造が変化し、直接遷移化する可能性が示唆されている。しかしながら、実験的にSi基板上 $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>の遷移型は明らかにされておらず、ひずみによるバンド構造変化も実証されていない。本論文は、 $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>におけるひずみによるバンド構造制御を検証することを目的とし、実験および理論的視点からそのひずみ制御の実現可能性について纏めたものであり、以下の知見を得ている。

- (1) 分子線エピタキシャル技術を基盤として、Si基板上への $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>成長における最適成長条件の探索を行っている。その結果、既報告よりも良好な配向性を有する試料の作製に成功している。
- (2) Si基板上 $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>エピタキシャル膜について、ひずみとバンド構造変化の検証を行っている。バルク単結晶試料とSi基板上 $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>エピタキシャル膜の比較、および異なるSi/ $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>ヘテロ界面数を持つ試料の直接遷移エネルギーを比較することにより、ヘテロ界面に起因したひずみが $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>のバンド構造に影響を及ぼすことを実証している。また、Si基板上 $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>エピタキシャル膜に対して、熱処理または成長条件を変化させて格子変形を導入することにより直接遷移エネルギー( $E_g$ )が減少すること、そして格子変形の導入方法に依存せず格子定数の変化量と $E_g$ の減少量に相関があることを明らかにしている。これにより、これまで第一原理計算で理論面のみで示されていたひずみとバンド構造の相関を初めて実験的に実証している。 $a$ 軸格子定数を更に0.21%程度伸長させることにより、直接遷移化に至る可能性を示唆する知見を得ている。
- (3) 実際の試料に即した条件で第一原理計算を行い、 $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>のバンド構造に対するひずみの効果の更なる検証を行っている。その結果、 $a$ 軸と $b$ 軸の格子定数伸長が $E_g$ 減少に大きく寄与すること、更に原子間距離まで着目して調べたところ、Fe-Fe原子間距離の伸長が $E_g$ 減少に寄与する可能性を明らかにしている。
- (4) Si基板上 $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>エピタキシャル膜に対して第三元素添加によりひずみ制御を行うことを目指している。AlとGeについて、 $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>エピタキシャル膜へ添加可能であること、また、添加により格子定数が増加することを実証しており、今後の $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>エピタキシャル膜ひずみ制御技術の確立に向けて重要な指針を得ている。

以上のように、本論文は $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>におけるひずみによるバンド構造制御について、実験および理論の両面から系統的に明らかにするとともに、第三元素添加によるバンド構造の能動的制御の実現可能性を提案する等、新しい知見を与えていることから、材料工学分野に寄与するところが大きい。

よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。