

Title	Ge/Siヘテロエピタキシャル成長の歪み緩和と刃状転 位形成機構
Author(s)	藤本, 義隆; 押山, 淳
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2011, 1, p. 23-26
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/70445
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

Ge/Si ヘテロエピタキシャル成長の歪み緩和と刃状転位形成機構

藤本 義隆¹⁾、押山 淳²⁾ ¹⁾東京工業大学 大学院理工学研究科 物性物理学専攻 ²⁾東京大学 大学院工学系研究科 物理工学専攻

1. はじめに

Si 系半導体デバイスの性能向上は、その基本素子 である電界効果型トランジスタの素子サイズのスケ ーリング(比例縮小化)と高集積化によって支えら れている。しかしながら、微細化による素子の性能 向上に限界が見え始めつつあることから、スケーリ ング則に依存しない新たな性能向上技術の模索が必 要となってきた。その一つとして、電気的なキャリ ア移動度が Si よりも高い Ge を Si 基板上に作製し、 それをトランジスタのチャネルとして利用した高速 電子デバイス応用への試みがある。

Si(001) 基板上の Ge 層成長では、それらの 4%程 度の格子定数の違いから、Ge 層は圧縮歪みを受け、 Ge 層の増加とともに歪エネルギーが増大する。その 結果、ある臨界膜厚を超えるとミスフィット転位が 発生し、歪エネルギーを解放する。このように生じ た転位は、Ge 膜の構造的な不均一性などからくる表 面荒れや膜質の劣化を招き、ひいてはキャリア移動 度の低下などデバイス特性の劣化を引き起こすこと が報告されている[1]。近年、この Ge 膜質の劣化を 防ぐ方法として、水素などのサーファクタントを用 いたエピタキシャル成長技術が提案されている[2]。 これにより形成された Ge/Si ヘテロ構造の Ge 膜と Si 基板の間には、界面に沿って刃状転位が形成され、 その結果、高品質な Ge 膜が作製されることが報告 されている[3]。しかしながら、Si 基板上の Ge 膜の 成長過程における初期段階での表面形態、転位を引 き起こす欠陥構造、いわゆる転位芯構造や、転位が 発生する臨界膜厚など基礎的な知見が十分得られて いないのが現状である。このため、Ge/Si ヘテロ構造 における更なる高品質な結晶膜作製の実現には、Si 基板上の Ge 層成長過程における歪緩和機構と転位 発生の基本的性質をマイクロスケール、特に原子レ ベルの観点から理解することが求められる。

本稿では、Si(001)基板上の Ge 膜成長における歪 緩和機構や刃状転位の形成機構を量子力学の電子論 的立場から明らかにするために、密度汎関数理論の 第一原理に基づいた高精度電子構造計算を実行し、 そこから得られた結果を報告する[4,5]。

2. 計算方法

本研究では、密度汎関数理論(DFT)に基づいた第 一原理電子構造計算手法を用いている[6]。この第一 原理電子構造計算とは、実験値などの経験的パラメ ーターを用いずに、式(1)に示す1電子のシュレディ ンガー方程式に対応するようなKohn-Sham 方程式 を解く方法である[7]。そして、取り扱われている系 の全エネルギーから各原子に働く力を求め、その力 に沿って原子核の位置を変化させ、全エネルギーの 最小値(極小値)を求める。これはちょうど、対象 となっている物質のエネルギー的安定構造を求めて いることに対応する。このような方法により得られ た Si 結晶などの固体の構造的特性(格子定数、ボン ド長など)は、実験値と比較してもその誤差が1% 程度以下であることが知られている。解くべき Kohn-Sham 方程式は、

$$\begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\nabla^{2} + \upsilon_{ext}(\mathbf{r}) + \int \frac{\rho(\mathbf{r})}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + \upsilon_{xc}(\mathbf{r}) \end{bmatrix} \boldsymbol{\varphi}_{i} = \varepsilon_{i} \boldsymbol{\varphi}_{i} \quad (1)$$
と書かれる。ただし、電子密度 $\rho(\mathbf{r})$ は、

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i} |\boldsymbol{\varphi}_{i}(\mathbf{r})|^{2} \quad (2)$$

である。ここで、第1項は電子の運動エネルギーを 表し、第2項v_{ext}(r)は原子核からの寄与を含めた外 場ポテンシャル、第3項は電子の古典的なクーロン 相互作用を表している。最後の第4項v_{xc}(r)は交換・ 相関ポテンシャルと呼ばれ、量子的な電子間の相互 作用を表わしている。ただし、v_{xc}(r)は、局所密度 近似(LDA)によって近似された関数形を用いている。

具体的な系の構造的安定性や電子特性を調べるた めには、式(1)で表した Kohn-Sham 方程式の解を数値 的に精度良く求めることが必要である。このために、 本研究では3次元の空間を有限のグリッドで分割す る実空間差分法を採用した実空間密度汎関数理論 (RSDFT)コードを用いている[8]。この実空間差分法 の主な利点は、①取り扱う系の空間を小さな部分空 間に分割することが出来るため、それらを各計算ノ ードに容易に振り分けることができ並列計算機に向 いている、②取り扱う行列の要素が対角要素付近に 集中しているため、行列の演算コストが極めて少な く済むなどが挙げられる。実空間差分法に関する詳 細は文献[9]、RSDFT コードについては文献[8]に書 かれてある。

Ge/Si 系へテロエピタキシャル成長と 刃状転位

1. 刃状転位の転位芯構造

図1の左図には、巨視的なイメージとしての Si 基板上の Ge 膜とそれらの界面近傍にある刃状転位 のイラストを描いている。また、図1の右図には、 本研究で提案している転位芯の原子構造として 5 員 環と7員環のペア構造を示している。この欠陥構造 を導入することで、Si 基板の約4%の格子不整合を 解消するように Ge 結晶を積むことができる。この



図1 Si 基板上のGe 膜とそれらの界面近傍にあ る刃状転位(左図)。5-7員環からなる転位芯 の原子構造(右図)。

ため、[110]方向に並んだ24周期構造のSi基板中に、 ただ一つの5-7転位芯構造を導入する。このように、 転位のある長周期の結晶構造を取り扱うため、ここ では最大で千数百原子群の大規模なDFT計算を実 行する必要がある。

2. エピタキシャル成長のエネルギー論

Si 基板上に作成された Ge 膜の成長過程を議論するために、フィルムエネルギーを

$$\gamma_{\rm f} = \frac{E - m_{\rm Si} \mu_{\rm Si} - m_{\rm Ge} \mu_{\rm Ge} - m_{\rm H} \mu_{\rm H}}{\rm S} - \Gamma_{\rm b} \quad (3)$$

として定義する。ここで、Eは系の全エネルギー、 m_{Si} 、 m_{Ge} 、 m_{H} はそれぞれ Si、Ge、Hの原子数を、 μ_{Si} 、 μ_{Ge} 、 μ_{H} はそれぞれ Si バルク、圧縮された Ge バルク、H₂分 子の化学ポテンシャルを表している。また、S は(001) 面の面積を、 Γ_b はスラブモデル計算によって生じる 下層の表面エネルギーを示している。この Γ_b は、計 算モデルから生じる不必要なエネルギーであるため、 全体から差し引かれている。

図2には、転位の存在しない2×1構造と5-7転位 構造に関して、式(3)で定義されたフィルムエネルギ ーのダイアグラムを示している。まず、Ge層に関す るフィルムエネルギーの振る舞いを見るために、 2×1構造に着目する。この2×1構造は、Ge膜中に転 位の欠陥構造が存在しない構造である。Ge層が増加 するとともに、フィルムエネルギーが減少していく ことが見て取れる。そして、おおよそ4層になると 一定の値Y²⁰_{2×1}に近づいていることが分かる。この Y²⁰_{2×1}は、Ge表面がSi基板との相互作用が無視でき るほど、十分Ge層が積まれた時の2×1構造のフィ ルムエネルギーを示している。そのため、Ge層を4 層程度積むと2×1構造のフィルムエネルギーは、そ れ以上Ge層を積んでも変化しないことが分かる。

次に、図1に示すような5-7転位構造が生じてい る場合について考える。転位が発生するには、その 核となる転位芯がGe 膜とSi 基板の界面近傍のどの 位置でエネルギー的に最も安定であるかを決めるこ とが重要である。なぜならば、転位芯よりも下側の Si 基板に近いGe 層は圧縮歪みを受けているが、転 位芯の上方にあるGe 層は、歪みを受けていないた めである。そのため、まずエネルギー的に安定な転 位芯の位置を決めることを考える。図 2(a)の転位構 造モデル A1 から A3 には、5-7 転位芯が Ge 膜の表 面にある場合を表している。このときの A1-A3 モデ ルでは、積まれる Ge 層の増加とともに、転位芯と Si 基板との間の Ge 層が増加していることに注意す る。この場合のフィルムエネルギーの振る舞いは、 2×1 構造の場合と同じように Ge 層が増加すると、フ ィルムエネルギーが減少していき、やがてある一定 値 Yoc に近づく。ここで、Yoc は Yox 1 と同様に Ge 表 面近くにある 5-7 転位芯と Ge/Si 界面との相互作用 が無視できるほど十分小さい場合でのフィルムエネ ルギーを表している。図 2(b)の結果から、フィルム エネルギーが 4 層で Yoc に到達していることから、 5-7 転位芯は A2 モデルの位置にあることが、エネル ギー的に好まれることが分かる。

次は、いま決定した 5-7 転位芯の上方に Ge 層が積 層されていく状況を考える。すなわち、図 2(a)の転 位構造モデル B2 から B5 にあるように、構造モデル A2 の表面に Ge 層が作成されていく場合を考える。



図 2 (a)Ge/Si ヘテロ構造における刃状転位構 造図。A1-A3 は、転位芯が Ge 表面に存在す る場合、B2-B5 は、転位芯が Ge/Si 界面に存 在する場合の転位構造図。(b)フィルムエネル ギーの Ge 層数依存性。A1-A3 と B2-B5 はそ れぞれ図 2(a)の構造に対応するフィルムエネ ルギーを表している。

図 2(b)から明らかなように、Ge レイヤーの増加とと もにフィルムエネルギー(B2-B5)が減少していく様 子が分かる。そして、ちょうど転位構造 B5 のとき、 2×1 構造のフィルムエネルギーY[∞]_{2×1}よりも転位構造 のフィルムエネルギーが低くなる。これは、Si 基板 上の Ge レイヤーが、成長初期段階では 2×1 構造を 保っているが、12 層積まれると転位構造 B5 へと変 化する。すなわち、転位が発生する臨界膜厚は 12 層であることが分かる。

3. 走査型トンネル電子顕微鏡像

前節で述べたように、Ge 層が 12 層程度積まれる と転位が生じることが分かった。このように転位芯 は、Ge 膜表面から十分離れた Ge/Si 界面近傍に埋も れているため、その原子構造などの情報を得ること は非常に困難である。ここでは、結晶深部にある転 位構造を、Ge 表面を観察することでその位置を検知 できる可能性を示す。また、Ge 表面を観測する方法 として、走査型トンネル電子顕微鏡(STM)を用いる ことを提案する。STM は、半導体や金属表面を原子 レベルで観測できる有用な方法として広く知られて いる。STM におけるトンネル電流 I は、表面からの 位置 r での状態密度をρsとすると

$$I \propto \int_0^{e_V} \rho_{\rm s}(\mathbf{r}, E_F - eV + \epsilon) d\epsilon \tag{4}$$

の関係が成り立つ。ここで、Vは印加される電圧、 E_F はフェルミエネルギーである。したがって、シミ ュレーションによる STM 像は、表面の状態密度を フェルミエネルギーから印加電圧まで積分すること により求めることができる[10]。



図 3 シミュレーションによる STM 像: (a) 価 電子帯、(b)伝導帯に関する像。印加電圧はど ちらも 0.5 V とした。

図3には、本計算により得られた転位構造モデル B5(図2(a))のSTM像を示している。図3(a)には価 電子帯に関するSTM像を、図3(b)には伝導帯に関す るSTM像を示している。これらのSTM像は、構造 モデルB5の上方からみていることに対応する。価 電子帯のSTM像(図3(a))には、中央付近で暗い(黒 い)線が見えることが分かる。また、伝導帯の場合(図 3(b))では、逆に中央付近に明るい(白い)線が見ら れる。これらのSTM像に見られる暗い、あるいは 明るい線は、ちょうど転位芯構造の上方にあたる。 このように転位が発生すると、[1-10]方向に沿って暗 い、あるいは、明るい転位線がSTM像内に極めて 明瞭に現れる。

4. まとめ

本稿では、次世代半導体デバイス産業の基盤技術 に関わる Ge/Si ヘテロ構造のエピタキシャル成長に 関するテーマを紹介した。千数百原了群からなる刃 状転位構造の計算モデルを取り扱う必要性から、実 空間密度汎関数計算コードを大阪大学サイバーメデ ィアセンターのスーパーコンピューター上で実行し、 基板上の歪みを受けた Ge 膜成長での歪み開放メカ ニズムと刃状転位形成過程のエネルギー論を明らか にした。また、刃状転位構造の STM 像の計算を実 行し、原子レベルで転位線の観測が可能であること を示唆する結果を得た。

謝辞

本研究の一部は、東京工業大学グローバル COE プログラム「ナノサイエンスを拓く量子物理学拠点」 の支援を受けたことを記し、謝意を表します。また、 本稿で紹介した計算は大阪大学サイバーメディアセ ンターの SX-8R および SX-9 を主に利用して行った ものです。最後に、本寄稿の執筆を依頼してくださ いました大阪大学サイバーメディアセンター広報委 員会に感謝いたします。

参考文献

S. H. Olsen, A. G. O'Neill, D. J. Noriis, A. G. Cullis,
 N. J. Woods, J. Zhang, K. Fobelets: Semicond. Sci.

Technol. 17 (2002) 655.

[2] M. Copel, M. C. Reuter, E. Kaxiras, and R. M. Tromp: Phys. Rev. Lett. 63 (1989) 632.

[3] A. Sakai, T. Tatsumi, and K. Aoyama: Appl. Phys. Lett. **71** (1997) 3510.

[4] Y. Fujimoto and A. Oshiyama: Phys. Rev. B 81 (2010) 205309.

[5] Y. Fujimoto and A. Oshiyama: AIP Conference Proceedings, in press.

[6] P. Hohenberg and W. Kohn: Phys. Rev. 136 (1964)B864.

[7] W. Kohn and L. J. Sham: Phys. Rev. 140 (1965) A1133.

[8] J. –I. Iwata, D. Takahashi, A. Oshiyama, T. Boku, K. Shiraishi, S. Okada, and K. Yabana: J. Comp. Phys. 229 (2010) 2339.

[9] K. Hirose, T. Ono, Y. Fujimoto, and S. Tsukamoto:First-Principles Calculations in Real-Space Formalism,Imperial College Press, London (2005).

[10] J. Tersoff and D. R .Hamann: Phys. Rev. B 31

(1985) 805; H. Okada, Y. Fujimoto, K. Endo, K. Hirose, and Y. Mori: *ibid* **63** (2001) 195324; Y. Fujimoto, H.

Okada, K. Endo, T. Ono, S. Tsukamoto, and K. Hirose: Mater. Trans. **42** (2001) 2247.