

X線非弾性散乱によるバルク SiGe 単結晶のフォノン分散測定 Phonon Dispersion Measurements for Bulk SiGe Crystal by Inelastic X-ray Scattering

臼田 宏治^a, 小柳 有矢^b, 横川 凌^b, 小椋 厚志^b
Koji Usuda^a, Yuya Oyanagi^b, Ryo Yokogawa^b, Atsushi Ogura^b

^a東芝メモリ株式会社, ^b明治大学
^aToshiba Memory Corporation, ^bMeiji University

近年、半導体素子の特性向上に向けて Si に代わる新しい半導体材料として SiGe のような混晶系材料が注目されている。このような新半導体材料の特性を検討するための指標としてはキャリア移動度が広く用いられており、その支配的要素の一つがフォノン散乱である。即ち、新材料の開発に当たっては移動度変化をもたらすフォノン散乱などの詳細な理解が必須であるが、Si や Ge といったバルク結晶と異なり、新材料系の散乱機構は複雑で情報が乏しく、特性向上を目指す上では、統轄的なフォノン分散の理解が急務である。そこで報告者らは、SiGe 混晶結晶のフォノン分散解析に注目し、X線非弾性散乱(Inelastic X-ray scattering, IXS)法による測定を検討したので報告する。

キーワード： 歪み SiGe、フォノン分散、X線非弾性散乱

背景と研究目的：

近年、半導体素子の特性向上に向けて従来の Si から新材料へ置き換えるための検討が著しい。それらの新材料の特性比較においては、キャリア移動度がその指標として広く用いられ、移動度の決定要因としてしばしばバンド構造由来の有効質量が議論されている。一方、もう一つの重要なキャリア移動度決定要素としてはキャリア散乱があり、その散乱機構の支配的要素と考えられるフォノン散乱の理解も重要である。ここに、例えば SiGe のような混晶系新材料は、Si プラットフォームへの適合のため、いわゆるバルク Si 結晶とは異なるヘテロ接合薄膜や多結晶薄膜などの形態である場合が少なくない。このような状況下では、例えば材料中へのひずみ印加による移動度向上が期待されるものの、その移動度変化を詳細に理解し確実に特性向上に結び付けるためには、無歪みでは散乱確率のないフォノン散乱を散乱機構に取り入れる必要が有る。即ち、次世代向けチャネル材料の散乱機構は複雑で、そのキャリア輸送特性を正確に理解するためには、フォノン分散を考慮した統括的なフォノン散乱機構の理解が重要と考えられる。しかしながら、多年の情報蓄積があるバルク Si や Ge 結晶とは異なり、混晶材料である SiGe の知見は非常に乏しく、バルク SiGe 結晶のフォノン分散の測定例すら乏しい事に申請者らは注目している。そこで、本課題では、次世代電子デバイス材料候補である SiGe 材料のフォノン分散データ取得の実現と、その詳細な知見にもとづくポスト Si 混晶材料の産業応用加速をその目標として、放射光による SiGe 単結晶のフォノン分散の直接測定可否の検討を実施した。

実験：

本実験のために適用した試料は Si(1-x)Ge(x)(x=0.721)の単結晶試料(厚み約 270 μm)である。その試料サイズは約 5 mmφ と小さく、本研究と同類の測定が可能で中性子散乱(一般的には 100 mm²程度の測定サイズ)では測定が難しいことから、BL35XU 設置の X線非弾性散乱装置(IXS)を利用した。測定系は、背面反射光学系を採用した非弾性散乱分光器、アナライザ、多軸回折系などを利用、実験は、結晶反射指数(999)、X線エネルギー17.7935 keV、分光器のエネルギー分解能 3 meV、ビームサイズ約 50 μm の条件(KB ミラー無し)で実施した。測定モードは、Γ 点から X 点までのブリルアンゾーンにおける光学モードでの測定を行った。逆格子空間における測定範囲は、LO で(600)-(500)-(400)、また TO については(600)-(610)で実施。測定エネルギーは、-10 meV~最大 70 meV までの範囲で、測定条件によって適宜変更した。

結果および考察：

今回、バルク SiGe(Ge 濃度：72%) 結晶の Γ 点から X 点までの縦光学(LO)フォノンおよび横光学(TO)フォノン分散を非弾性散乱測定実験で実施可能かを検討し、ピークが観測されると予測される全フォノンエネルギー帯(0–70 meV)でのスペクトル測定に成功した。

結果、図 1 に今回測定した TO フォノンスペクトル例を示す。試料中の Ge 組成が 72% と高いことから、Ge-Ge(vibration)振動モード、Ge-Si 振動モード起因のピークは強度が強く、Si-Si 起因のスペクトルはその強度が弱いことが予見される。測定結果は、予測通り、Ge-Ge、Ge-Si、Si-Si のスペクトルの順にそれぞれのピーク強度が弱くなることも確認された。

一方、図 2 に、バルク SiGe(Ge 濃度 72%) のフォノン分散測定結果を示す。 Γ 点から X 点に移動するに従い、縦光学(LO)フォノンエネルギーおよび横光学(TO)フォノンエネルギーが、それぞれ 5 meV 程度減少することが初めて測定された。即ち、バルク SiGe 結晶でのフォノン分散関係の解析が、 Γ 点から X 点において可能であることが確認できた。

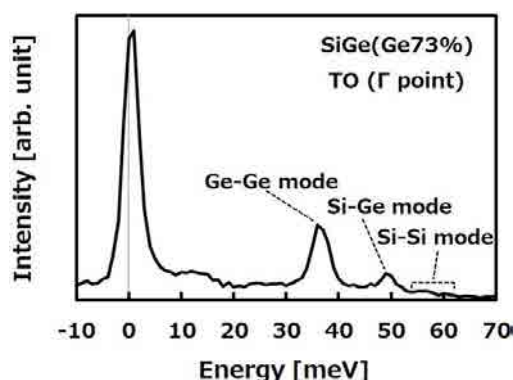


図 1. バルク SiGe(Ge 濃度 72%) の非弾性散乱スペクトル(TO-mode)

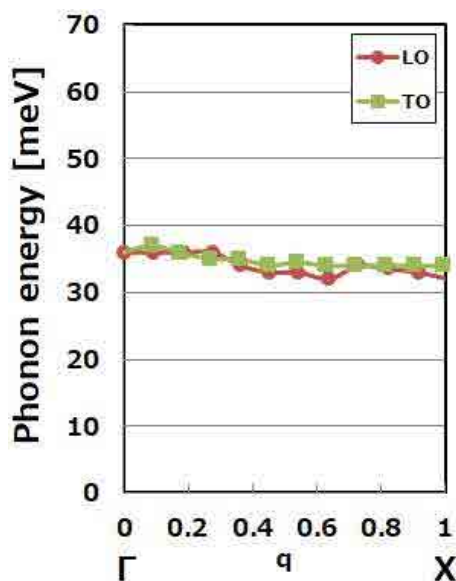


図 2. バルク SiGe(Ge 濃度 72%) のフォノン分散関係
(●：縦光学モード、■：横光学モード)

以上、本結果より、SiGe 混晶のフォノン分散測定に X 線非弾性散乱測定が有効であることを、光学モード測定で確認することができた。本報告の光学モードに加えて、音響モードの測定、さらにはひずみ SiGe 結晶の分散の検討が実現すれば、従来不明確であった混晶材料系の移動度向上要因を詳細に検討することができると期待される。

今後の課題：

一般的には取得が難しいフォノン分散に関する情報取得が可能である事が確認された一方で、精密な解析の実現には広いブリルアンゾーン領域にわたる膨大なデータの取得が必要であることが確認された。即ち、時間的制約への対応が重要で、試料の取り付け角度などの確認や体系的なデータ取得を可能とする詳細な実験計画の準備などが重要である。他方、取得したデータの解析には未着手の先端分子動力学(MD)計算などによる理論的裏付けや解釈も不可欠であり、この観点での早急な整備も必要である。

謝辞：

試料を御提供頂いた元東北大学教授米永一郎様に感謝いたします。今回実施した国内外合わせて僅かに数か所でのみ実施可能な非弾性散乱測定にて、高輝度光科学研究センターの内山裕士様、筒井智嗣様、廣沢一郎様には、実験に着手する前の貴重な御助言、実験当日のサポートはもとより、取得結果の解析に至るまで、終始、多大なる御協力を頂きました。ここに御礼申し上げます。