

分子動力学法および分子軌道法を用いた SiGe 混晶内の原子間ポテンシャルに関する考察 Molecular Dynamics Study on Interatomic Potential in SiGe with Using Molecular Orbital Method

早稲田大学理工学術院¹、明治大学理工学部²、学振特別研究員 PD³

○富田 基裕^{1,2,3}、小椋 厚志²、渡邊 孝信¹

Waseda Univ.¹, Meiji Univ.², JSPS Res. Fellow PD³, M. Tomita^{1,2,3}, A. Ogura², and T. Watanabe¹

E-mail: tomita_motohiro@watanabe.nano.waseda.ac.jp

【はじめに】IV-IV 族混晶半導体は Si の代わりに高いキャリア移動度を有し、その他様々な応用が可能な次世代材料である。IV-IV 族混晶は Si と同じく歪技術が適用可能であり、先行研究では歪技術との併用が前提として研究が進められている。特に、次世代チャンネル材料としては SiGe が有力視されているが、歪 SiGe 層の微小領域に印加された歪場を正確に評価する手法開発が急務となっている。評価手法の一つとしてラマン分光法が挙げられるが、ラマンシフトと歪量を正確に結びつけるフォノン変形ポテンシャル(PDP)が未だ定まっていない。本研究では分子動力学(MD)法を用いて SiGe 混晶のフォノン振動を再現するため、MD 法と分子軌道(MO)法による SiGe 混晶内の原子間ポテンシャルに関する考察を行った。

【実験】Ge濃度を $x = 0 \sim 0.95$ まで変化させた $\text{Si}_{(1-x)}\text{Ge}_x$ 混晶モデルについて MD 計算を行った。Fig. 1(a)はGe濃度約0.3におけるモデルである。サイズは単位格子 $4 \times 4 \times 4$ 個分で、3次元周期的境界条件を課している。Si-Si原子間については Stillinger-Weber(SW)ポテンシャルを、Ge-Ge原子間については Ding-Andersen(DA)ポテンシャルを、Si-Ge原子間については上記2つのポテンシャルの相乗平均を用いた[1]。フォノン波数は MD 計算から得られる Hessian 行列を動力行列に変換し、その固有値から求めた。また、原子間ポテンシャルの周辺Ge原子数依存性を調べるために $\text{Si}_{(8-y)}\text{Ge}_y\text{H}_{18}$ ($y = 0 \sim 8$) クラスタについて MO 法によるエネルギー計算を行った。Fig. 1(b)に $\text{Si}_7\text{Ge}_1\text{H}_{18}$ および $\text{Si}_1\text{Ge}_7\text{H}_{18}$ クラスタモデルを示す(H原子は非表示)。Fig. 1(b)に示すようにクラスタ中央の Si-Ge 結合長を変化させ、エネルギーの変化を観測する。MO 計算には Hartree-Fock 法を、基底関数には 6-311++G** を用いた。

【結果】Fig. 2 に MD 法によって計算した SeGe 混晶内の Si-Si 光学フォノンの Ge 濃度依存性を示す。青線が MD 法による結果であり、エラーバーは初期原子配置に依存した計算誤差を示している。また、赤線は Tsang らによって報告された無歪 SiGe の Si-Si 結合のラマンシフト(フ

ォノン波数) $\omega_{\text{Si-Si}}^{\text{SiGe}} = \omega_{\text{Si-Si}}^{\text{Si}} - 0.62x$ の式に MD 計算により求められた $\omega_{\text{Si-Si}}^{\text{Si}} = 594.2 \text{ cm}^{-1}$ を代入した値を示している[2]。これらを比較すると、MD 法によって得られた SiGe のフォノン波数は $\omega_{\text{Si-Si}}^{\text{Si}}$ よりも低波数になっているが、既存の報告値と比較するとほぼ変化していない。これは、本計算で用いているポテンシャルでは SiGe 内のフォノン振動を再現できていないことを示している。Fig. 3 に MO 法によって計算した $\text{Si}_7\text{Ge}_1\text{H}_{18}$ 、 $\text{Si}_1\text{Ge}_7\text{H}_{18}$ クラスタの Si-Ge 結合長を変化させた時のエネルギー変化を示す。また、同図には緑線にて SW ポテンシャルに SW および DA ポテンシャルの相乗平均を代入した場合を示している。これらを比較すると、原子間の結合ポテンシャルは周辺原子に依存して変化している。以上の結果から、MD 計算において SiGe 混晶系を取り扱う場合は、ポテンシャルに周辺原子依存項を導入する必要があると提唱する。本研究の一部は、科研費特別研究員奨励費(15J07583)および基盤研究 B(15H03979)により補助を受けたものである。

[1] S. Ethier et al.: J. Mater. Res., 7 (1992) 2817.

[2] J. C. Tsang et al.: J. Appl. Phys. 75 (1994) 8098.

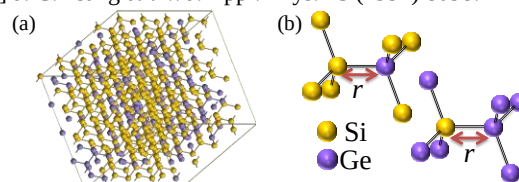


Fig. 1 Calculated models of (a) $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$ alloy in MD, (b) $\text{Si}_7\text{Ge}_1\text{H}_{18}$ and $\text{Si}_1\text{Ge}_7\text{H}_{18}$ cluster in MO (H is hidden).

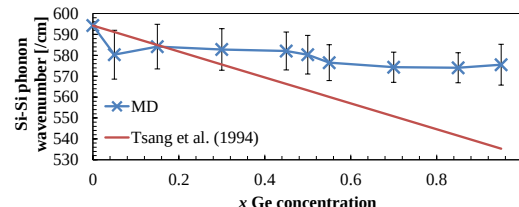


Fig. 2 Shift of optical phonon frequency depending on Ge concentration in SiGe alloy calculated by MD.

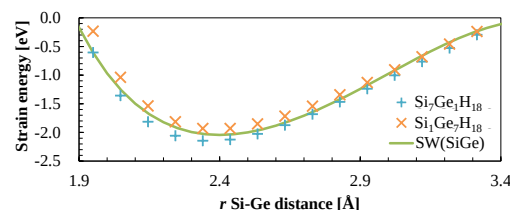


Fig. 3 Strain energy and SW potential with geometric mean of SW and DA in $\text{Si}_{(8-y)}\text{Ge}_y\text{H}_{18}$ calculated by MO.