

GeSnC 系薄膜の表面近傍における C と Sn 原子の 形成エネルギーと熱平衡濃度の算出 Calculation of formation energy and thermal equilibrium concentration of C and Sn atoms in GeSnC thin film

岡山県大院情報系工¹, 岡山県大情報工² ○(M2) 只野 快¹, 末岡 浩治²
Graduate School of Engineering, Okayama Pref. Univ.¹, Okayama Pref. Univ.²
○Kai Tadano¹ and Koji Sueoka²
E-mail: dtn0067@yahoo.co.jp

現在, Ge はポスト Si 材料として注目されている. 例えば, Ge 中に Sn を 10%程度導入することで, GeSn は直接遷移型になることが示されており, IV 族半導体による発光デバイスの実現が期待されている[1, 2]. 本研究では, GeSnC 系薄膜の表面近傍における C と Sn 原子の形成エネルギーを計算し, その結果を用いて表面から深さ方向における C や Sn 原子の熱平衡濃度を算出することを目的とした[3].

Ge 単結晶から (001) 表面を切り出して, 128 原子からなる 32 層の薄膜モデルを作成した. このモデルの置換位置に C または Sn 原子を導入し, 第一原理計算法により構造最適化することで全エネルギーを求め, 形成エネルギーを算出した. モデルには 3 次元周期境界条件を課した.

Ge(001) 薄膜モデルの各層に, Sn 原子を 1 個導入する際の形成エネルギーを図 1 に示す. 横軸は Sn 原子が存在する層を示し, 表面ダイマーの形成に起因して異なる Sn 原子の配置を Site-a₁, Site-a₂, Site-b で示してある. また, Ge バルク中の Sn 原子 1 個の形成エネルギーを太実線 (Bulk) で示している. これより Sn 原子の最安定位置は 1 層目の Site-a₁ であり, Ge バルク中の値より約 0.4 eV 低いことがわかる. また, 5 層目より内部に取り込まれた Sn 原子の形成エネルギーは Ge バルク中の値と近づいており, 表面の影響をほとんど受けていないことが分かる.

次に図 1 の結果を用いて, Ge 薄膜中の各層における Sn 原子の熱平衡濃度を算出した. その結果を図 2 に示す. ここでは, 代表的な成膜温度である 723K (450℃)における Sn 原子の熱平衡濃度と Ge バルク中の Sn 原子の熱平衡濃度の比を示している. これより Sn 原子の熱平衡濃度は最表面で最も高くなり, Ge バルク中の約 10³ 倍に増加していることがわかる. また 5 層目より内部に取り込まれた C 原子の熱平衡濃度はバルク中の値と近く, 表面の影響をほとんど受けていない.

本研究では, さらに Ge(001) 表面近傍における C や Sn の単独導入および, C と Sn の同時導入について, 表面から各層における独立な原子配置数を求め, それらの形成エネルギーと熱平衡濃度を算出した. 当日はこれらの結果についても議論する.

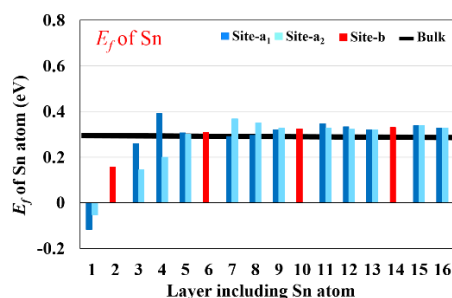


図 1 Ge 薄膜中の Sn 1 個の形成エネルギー

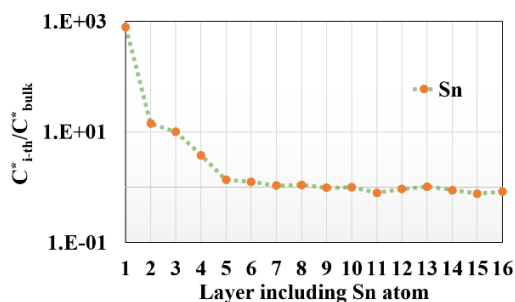


図 2 Ge 薄膜中の Sn の熱平衡濃度 (バルクの値を基準)

参考文献

1. Y. Chibane, M. Ferhat, *J. Appl. Phys.* **107** (2010) 053512.
2. V. R. D'Costa, C. S. Cook, A. G. Birdwell, C. L. Littler, M. Canonico, S. Zollner, J. Kouvetakis, and J. Menendez, *Phys. Rev. B* **73** (2006) 125207.
3. E. Kamiyama, R. Matsutani, R. Suwa, J. Vanhellemont, and K. Sueoka, *Mater. Sci. Semicond. Process.* **43** (2016) 209.