

応力印加 Ge 単結晶中におけるドーパント近傍の 点欠陥形成に関する第一原理解析 (2)

First principle analysis of intrinsic point defect formation in stressed single doped Ge crystal (2)

岡山県大院情報系工¹, 岡山県大情報工² ○山岡 俊太¹, 小林 弘治¹, 末岡 浩治²

Graduate School of Okayama Pref. Univ.¹, Okayama Pref. Univ.²

○Shunta Yamaoka¹, Koji Kobayashi¹, and Koji Sueoka²

E-mail: shunjob0918@gmail.com

現在, キャリア移動度の大きさから, Si LSI のチャンネル部として Ge 薄膜を用いることが検討されている[1]. このため, Si と比べて研究が少ない Ge の物性について, 基礎データの充実が求められている. さて, Si と Ge の格子定数の違いや LSI の構造に起因して, Ge 薄膜には MPa~GPa オーダーの外部応力が加わる. しかし, 外部応力が印加された Ge 結晶中に存在するドーパントが点欠陥 (原子空孔 V と格子間 Ge I) の形成に与える影響については, ほとんど報告がない.

本研究では等方性圧縮応力 (0.5, 1.0 GPa) あるいは等方性引張り応力 (-0.5, -1.0 GPa) を印加したものと, 応力を印加していない, 計 5 種類のモデルを用いた. 各モデルは Ge 64 原子からなる立方体形状をしており, ドーパント元素として B, Ga, C, Sn, Sb を考慮した. さらに, これらが Ge 結晶中の点欠陥の形成エンタルピーに与える影響に関する第一原理計算を行った.

計算結果の例として, 図 1 に等方性外部応力下における Ga 近傍での I の形成エンタルピーの計算結果を示す. ここで, 形成エンタルピーはドーパントを含まない場合の値を基準としている. これより, (1) Ga 近傍では I の形成エンタルピーが低下すること, (2) 外部圧縮応力により I の形成エンタルピーは増加し, これはドーパントを含まない Ge 結晶中とは逆の傾向であることがわかった. 図 2 に等方性外部応力下における 450 °C の V と I の熱平衡濃度差の Ga 濃度依存性を示す. これより (1) $3 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ 程度の Ga が添加された Ge 結晶では, V と I の熱平衡濃度がほぼ等しくなること, (2) GPa オーダーの応力が印加されると, V と I の熱平衡濃度差は 2 倍程度変化する. 平面応力下でのドーパント近傍における点欠陥の形成についても計算を進めており, その結果は当日報告する.

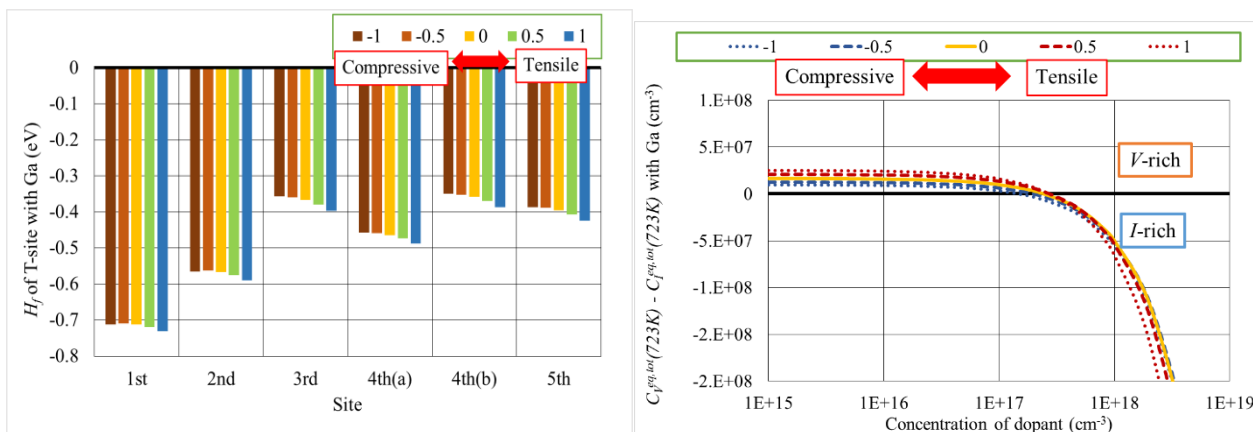


図 1 等方性外部応力下における Ga 近傍での I の形成エンタルピーの計算値 (左)

図 2 等方性外部応力下における点欠陥濃度の Ga 濃度依存性 (右)

参考文献

[1] J. Vanhellemont and E. Simoen, *J. Electrochem. Soc.*, **154**, H572 (2007).