

## X線非弾性散乱法による Bulk SiGe 低エネルギー側フォノンスペクトルの フォノン分散曲線評価

### Evaluation of Phonon Dispersion for Low Energy Side Phonon Spectrum of Bulk SiGe by Inelastic X-ray Scattering

横川 凌<sup>1,2</sup>、竹内 悠希<sup>1</sup>、荒井 康智<sup>3</sup>、米永 一郎<sup>4</sup>、Sylvia Yuk Yee Chung<sup>5</sup>、  
富田 基裕<sup>5</sup>、内山 裕士<sup>6</sup>、渡邊 孝信<sup>5</sup>、小椋 厚志<sup>1,2</sup>

(1. 明治大理工、2. 再生可能エネルギー研究インスティテュート、3. JAXA、  
4. 東北大学、5. 早稲田大理工、6. JASRI)

○R. Yokogawa<sup>1,2</sup>, H. Takeuchi<sup>1</sup>, Y. Arai<sup>3</sup>, I. Yonenaga<sup>4</sup>, S. Y. Y. Chung<sup>5</sup>, M. Tomita<sup>5</sup>,  
H. Uchiyama<sup>6</sup>, T. Watanabe<sup>5</sup>, and A. Ogura<sup>1</sup>

(1. Meiji Univ. 2. MREL 3. JAXA 4. Tohoku Univ. 5. Waseda Univ. 6. JASRI)

E-mail: r\_yokogawa@meiji.ac.jp

【背景と目的】 SiGe混晶はSi、Geと比較して熱伝導率が小さいため、次世代熱電デバイスへの応用が期待され、その熱伝導率低下のメカニズムの解明に向けてSiGeにおけるフォノン散乱と分散曲線の理解・把握が極めて重要となる。しかし、SiGeのフォノン散乱機構は単純なSi、Geと異なり複雑であり、先行研究では光学・音響フォノンに加えて幾つかの局在振動モードの存在が報告されている[1]。我々はこれまでにフォノンエネルギーを選択的に測定可能なX線非弾性散乱 (IXS: Inelastic X-ray Scattering) を用いて低エネルギー側に新たなフォノンスペクトルが出現することを報告した[2]。本研究では、SiGeのフォノン散乱機構を理解するため、低エネルギー側に出現するフォノンスペクトルのフォノン分散および熱伝導率の関係について詳細に検討し、その結果について報告する。

【実験】 試料はCz法[3]で作製されたGe組成16、72%のBulk SiGe、およびTraveling Liquidus Zone法[4]で作製されたGe組成32、45%のBulk SiGeで、事前にX線回折法で全てのBulk SiGeが単結晶であることを確認した。IXS測定は、SPRING-8のBL35XUに設置されたIXS装置を用いた。X線のエネルギー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の条件で実施し、Γ点からX点までのブリルアンゾーンを測定した。

【結果・考察】 低エネルギー側に位置する新たなフォノンスペクトルの一例として、Γ点におけるBulk SiGe (Ge: 16%)の光学モードIXSスペクトルを図1に示す。結果、Ge組成16%のBulk SiGeにおいて、低エネルギー側のフォノンスペクトルは光学モードのGe-Ge、Si-Geモードよりも強度が高いことが明らかになった。さらにこのピークは他のGe組成試料でも観測され、またΓ点以外でも出現することを確認した[5]。

図2にTAモードと低エネルギー側フォノンスペクトル分散曲線のGe組成依存性を示す。Ge組成の増加に伴い、TAモードは低エネルギー側にシフトし、明確なGe組成依存性が確認された。一方で、低エネルギー側のフォノンスペクトルは運動量およびGe組成に依存せず、ほぼ一定のエネルギーを示すことが明らかになった[5]。これらのフォノン分散はTAモードと近く、熱輸送に大きく関与することが示唆される。以上、このフォノン物性はSiGeの低熱

伝導率メカニズム解明に重要であると考えられる。

【謝辞】 本研究はJASRI (課題番号: 2016A1496、2017B1630、2019A1678、2019B1750) の認可、およびJST-CREST(JPMJCR19Q5)の補助を受けたものである。また、本研究にあたり、実験・解析に関し多大なるご助言をいただいた(株)キオクシア 白田 宏治氏に感謝申し上げます。

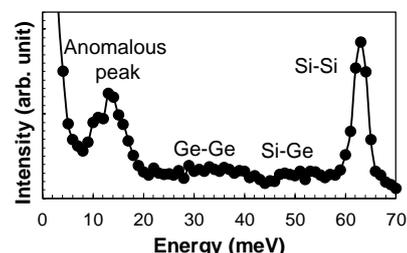


Fig. 1 IXS spectrum of Bulk Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> (x = 0.16) at the Γ point obtained by IXS.

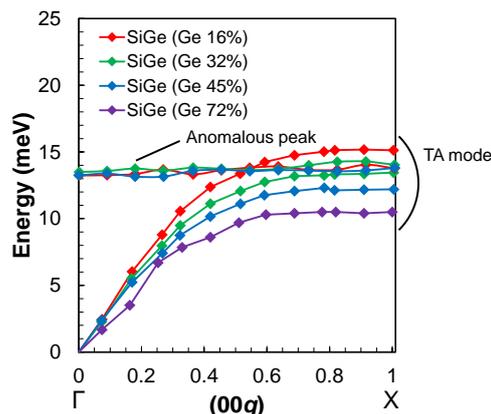


Fig. 2 Ge fraction dependence of phonon dispersion curves for TA mode and anomalous peaks (phonon spectra on the low energy side).

[1] O. Pagès *et al.*, Phys. Rev. B, **86**, 045201 (2012).

[2] 横川 他, 第 80 回応用物理学会秋季学術講演会講演予稿集, 17-034 (2019).

[3] I. Yonenaga, J. Cryst. Growth **275**, 91 (2005).

[4] K. Kinoshita *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **54**, 04DH03 (2015).

[5] R. Yokogawa *et al.*, Appl. Phys. Lett. **116**, 242104 (2020).