X線非弾性散乱法による Bulk SiGe 単結晶フォノン分散曲線の測定

Phonon Dispersion Measurements for Bulk SiGe Crystal by Inelastic X-ray Scattering

 $^{\circ}$ 横川 凌 1,2 、竹内 悠希 1 、荒井 康智 3 、米永 一郎 4 、内山 裕士 5 、小椋 厚志 1,6

(1.明治大理工、2.学振特別研究員 DC、3. JAXA、4. 東北大学、

5. JASRI、6. 再生可能エネルギー研究インスティテュート)

[°]R. Yokogawa^{1,2}, H. Takeuchi¹, Y. Arai³, I. Yonenaga⁴, H. Uchiyama⁵, and A. Ogura^{1,6}

(1. Meiji Univ., 2. JSPS Research Fellow DC, 3. JAXA, 4. Tohoku Univ., 5. JASRI, 6. MREL)

E-mail: r yokogawa@meiji.ac.jp

【背景と目的】 低熱伝導率を有するSiGe混晶 材料は、電子デバイスの特性向上はもとより熱 電素子などへの幅広い応用が期待され、その材 料特性を司る指標の一つにフォノン分散が挙 げられる。半導体中の熱伝導はフォノン散乱が 強く関わるため、その詳細な理解が必須である ものの、SiGeはBulk SiやGe結晶と異なり、混晶 材料であり、その散乱機構は複雑で、分散測定 例が乏しい。我々はこれまでにmeV分解能でフ オノンスペクトルが観測可能なX線非弾性散 乱(IXS: Inelastic X-ray scattering)法を用いて高 Ge濃度SiGe単結晶に関する光学・音響フォノ ン分散曲線の測定に成功した。そこで本報告で は、本研究の最初の目的であるフォノン分散の Ge濃度依存性解明の為、IXS法による様々なGe 濃度のBulk SiGe単結晶のフォノン分散曲線お よびフォノン物性を検討したのでその結果に ついて報告する。

【実験】 試料はCz法[2]で作製されたGe濃度 72%のBulk SiGe、およびTraveling Liquidus Zone (TLZ)法[3]で作製されたGe濃度32、45%のBulk SiGeで、事前に電子線後方散乱パターン法で全 てのBulk SiGeが単結晶である事を確認した。 IXS測定は、SPring-8のBL35XUに設置された装 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、およびビーム サイズは約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】 IXS 法で得たフォノンスペク トルから算出した Bulk Si_{0.55}Ge_{0.45} のフォノン 分散曲線を Fig. 1 に示す。Fig. 1 に示すように **Γ-X** 点間で光学・音響モード全てのフォノン 分散曲線を得ることに成功した。また光学モー ドは低エネルギー側から順に Ge-Ge、Si-Ge、 Si-Si モードの3種類存在し、全ての光学モー ドが音響モードと比較してエネルギーの運動 量依存性が小さい傾向にあることが明らかに なった。Fig.2にTAフォノン分散曲線のGe濃 度依存性を示す。先行研究で報告されている Pure Si[4]および Ge[5]の TA フォノン分散曲線 と比較すると、Ge 濃度が増加するに伴い Pure Si から Ge のフォノン分散曲線に近づく。LA フォノン分散関係でも同様の振る舞いが確認 された。また、Ge 濃度 72%Bulk SiGe と Pure Ge のフォノン分散曲線が概ね一致したため、 高 Ge 濃度 SiGe の音響フォノン速度は Pure Ge と同等であると予想される。一方で、低・中 Ge 濃度 SiGe は Pure Ge よりも運動量に対して音 響フォノンエネルギーの変化が大きい傾向で

あることから、音響フォノン速度が大きいこと が推測される。以上、これらの結果を踏まえ、 SiGe の劇的な熱伝導率の低下はフォノン速度 (群速度)ではなく、混晶化によるフォノン寿命 の低減に由来すると考えられる。

【謝辞】 本研究は JASRI (課題番号: 2016A1496、2017B1630、2019A1678、 2019B1750)の承認、および JSPS 科研費 (17J08240)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 言をいただいたキオクシア(株)臼田 宏治氏に 感謝申し上げます。

[1]横川 他, 第 80 回応用物理学会秋季学術講演会 講 演予稿集, 19p-E214-7 (2019).

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

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

[4] A. Valentin, *et al.*, Phys.: Condens. Matter **20**, 145213 (2008).

[5] M. Mohr, et al., Phys. Rev. B 73, 035217 (2006).



Fig. 1 Phonon dispersion curve of Bulk Si_{0.55}Ge_{0.45}.



Fig. 2 Ge fraction dependence of TA mode phonon dispersion curve for Bulk SiGe.