

XAFS を用いた単結晶バルク SiGe における Debye-Waller 因子の温度変化量評価 Evaluation of temperature variation in Debye-Waller factor of single crystal bulk SiGe by XAFS.

°吉岡 和俊¹、小笠原 凱¹、花房 秀政¹、西 優貴人¹、
荒井 康智²、広沢 一郎³、渡辺 剛⁴、横川 凌^{1,5}、小椋 厚志^{1,5}
(明治大理工¹、JAXA²、九州シンクロトロン光研究センター³、
高輝度光科学研究センター⁴、明大 MREL⁵)

°K. Yoshioka¹, G. Ogasawara¹, S. Hanafusa¹, Y. Nishi¹,
Y. Arai², I. Hirose³, T. Watanabe⁴, R. Yokogawa^{1,5}, and A. Ogura^{1,5}
(Meiji Univ.¹, JAXA², SAGA-LS³, JASRI⁴, MREL⁵)

E-mail: k_yoshioka@meiji.ac.jp

背景と目的: SiGe は Si に比べて高い移動度と低い熱伝導率を合わせ持つため、次世代の電子・熱電デバイス材料として期待されており、デバイス応用に向けたキャリアの散乱およびフォノン輸送の理解が重要である。我々はこれまでに、Si 基板上低 Ge 濃度 SiGe 薄膜における XAFS (X-ray Absorption Fine Structure) 測定により Ge と配位子間の局所的な原子振動と Ge 濃度との関係について報告した[1]。本研究ではさらに格子歪の無いバルク SiGe の XAFS 測定を行い、フォノンを特徴付ける Einstein 温度 (T_E) を推定することで、格子歪が SiGe に及ぼす影響を検討した。

実験手法: Traveling Liquidus-Zone 法により作製された Ge 組成比 32% および 45% のバルク SiGe を試料とし[2]、SPring-8 の BL14B2 で 10 K から 600 K までの Ge-K 吸収端の XAFS を透過法によって測定した。また、バルク Ge を参照試料とした。

結果および考察: Fig. 1 は Ge および SiGe における、10 K を基準とした Debye-Waller 因子(σ^2)の変化量 ($\Delta\sigma^2$)と温度の関係である。Fig. 1 より、Si と Ge を混晶化することで温度に対する $\Delta\sigma^2$ の変化が Ge よりも鈍化したことが分かる。また、Ge 組成比が $\Delta\sigma^2$ の変化に与える影響はごくわずかであった。さらに、格子歪の有無によらず $\Delta\sigma^2$ の温度変化量は同程度であった。よって、SiGe における Ge 組成比や歪状態は原子振動にほとんど影響を与えないことが明らかになった。またこのとき、 σ^2 は式(1)で表されるため[3]、 $\Delta\sigma^2$ は式(2)のように表せる。ただし、 T は絶対温度、 σ_s は静的な Debye-Waller 因子、 A は定数、 T_E は Einstein 温度である。

$$\sigma^2(T) = \sigma_s^2 + A \coth(T_E / 2T) \quad (1)$$

$$\Delta\sigma^2(T) = A \{ \coth(T_E / 2T) - \coth(T_E / 2 \times 10) \} \quad (2)$$

式(2)より求めた T_E と Ge 組成比の関係を Fig. 2 に示す。Fig. 2 より、Ge 組成比の増加に対して T_E は単調に減少すると推測される。

謝辞: 本測定は高輝度光科学研究センター (JASRI) の承認を得て、BL14B2 において実施された (課題番号: 2019A1773, 2019B1802, 2021A1661)。

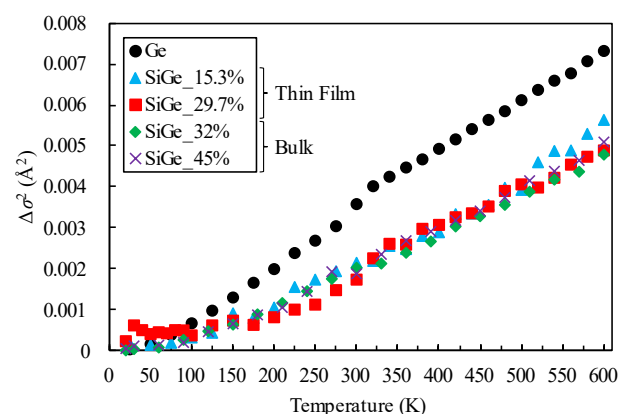


Fig. 1 Relationship between $\Delta\sigma^2$ and temperature.

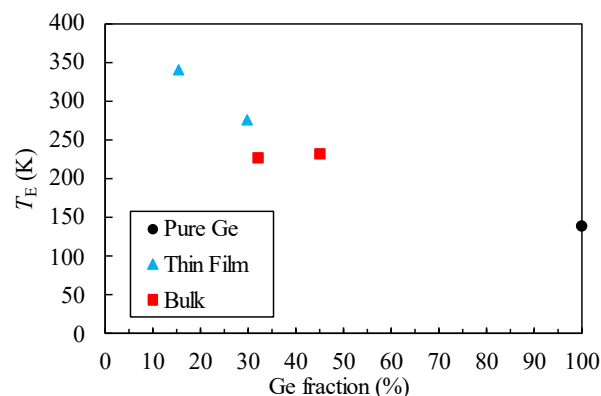


Fig. 2 Relationship between T_E and Ge fraction.

- [1] 吉岡和俊 他、第 67 回応用物理学会春季学術講演会 講演予稿集、12p-D519-4 (2020).
- [2] K. Kinoshita, *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **54**, 04DH03 (2015).
- [3] J. Purans, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **100**, 055901 (2008).