

氏名(本籍)	たか い けんたろう 高井健太郎(静岡県)		
学位の種類	博士(理学)		
学位記番号	博甲第4866号		
学位授与年月日	平成20年12月31日		
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当		
審査研究科	数理物質科学研究科		
学位論文題目	Theoretical Study on the Electronic Structure of the Vacancies in Compressively Strained Ge (圧縮歪みを受けたGe中原子空孔における電子構造の理論的研究)		
主査	筑波大学教授	工学博士	重川秀美
副査	筑波大学教授	理学博士	中村潤児
副査	筑波大学教授	理学博士	白石賢二
副査	筑波大学准教授	博士(理学)	岡田晋
副査	東京大学教授	理学博士	押山淳

論文の内容の要旨

半導体テクノロジーひいては人類の生活において最も重要な材料はシリコンであろう。地球上に豊富に存在する珪素の酸化物より、良質のシリコン結晶が生成され、様々なプロセスを経て、微細精緻な半導体デバイスが製造されている。ゲルマニウムもまた、シリコンに比べて高価ではあるが、電子デバイスとしてのより高い特性の実現のために、半導体テクノロジーを支える重要材料として用いられてきた。実際、1980年代には、シリコンとゲルマニウムのヘテロ接合形成技術が確立され、バイポーラーあるいは電界効果トランジスターが製作されている。

シリコンもゲルマニウムもダイヤモンド型の結晶型をとるが、その格子定数は4%ほど異なる。この格子不整合のために、シリコンとゲルマニウムの界面には、歪と応力が伴い、シリコン上のゲルマニウム薄膜は様々なモルフォロジーを示す。通常はStranski-Krastanov成長様式による、島状成長を見せるが、温度、ガス圧、あるいはサーファクタント効果により、pseudomorphicなゲルマニウム膜が形成される場合もある。こうしたゲルマニウム膜には必然的に大きな圧縮歪が生じているはずである。一方、ポストスケリング時代に入っているシリコンテクノロジーにおいては、歪による電気移動度の増加を利用したプロセスが、テクノロジーを牽引する重要な技術のひとつとなっている。しかしながら、歪膜中での原子の構造と電子状態についての、物理科学に立脚した研究は、テクノロジーの進展に比して、不十分である。とくに歪膜中での欠陥の原子構造、生成エネルギー、電子状態の解明は、半導体テクノロジーを支える基礎的知見となるものであるが、その微視的研究は皆無である。

本論文の目的は、シリコン上のゲルマニウム薄膜に着目し、圧縮歪の存在するゲルマニウム薄膜の原子構造と電子状態、とくに界面近傍に存在する原子空孔の振舞いを、量子論の第一原理に立脚した微視的理論計算により解明し、物理科学における新たな知見を得るという点にある。理論手法としては、密度汎関数法が用いられている。これは、電子同士の相互作用を量子論的效果である、交換相互作用および相関相互作用の

レベルまで考慮することができる理論手法であり、実際の物質の構造的性質、安定性を精度よく求めることが可能である。本論文では密度汎関数法の局所密度近似ならびに一般化密度勾配近似が使われており、その精度についても詳しい議論がなされている。また、原子空孔周囲の原子緩和の同定のために、原子空孔によって引き起こされる局在振動モードの周波数が、ダイナミカル行列を計算、対角化することによって求められている。さらに、電子スピン共鳴実験との将来的な比較のために、超微細構造定数が独自の殻電子補正計算手法により求められている。

本論文では、まず一軸性および双軸性の圧縮歪下でのゲルマニウムの構造的性質と、価電子帯、伝導帯の変調が調べられている。本論文で計算されている、歪下でのデフォメーション・ポテンシャルの大きさは、弾性理論による推定値および実験値と良い一致を示している。さらに、圧縮歪下での価電子帯上端の上昇、伝導帯下端の下降が計算で見出されており、これは圧縮歪のもとでのバンドギャップの減少という実験事実と整合している。本論文における理論手法の有効性を保証する結果とみなすことができる。

さらに本論文では、シリコン(001)基板上のゲルマニウム薄膜をスラブ模型でシミュレートし、そこでのGe原子空孔の原子および電子構造が明らかにされている。界面各原子層に単原子空孔、複原子空孔、三原子空孔が生成される場合の、周囲原子の緩和、生成エネルギー、電子状態が詳細な第一原理計算によって調べられている。いずれの原子空孔の場合にも、空孔周囲の〈110〉方向に隣り合う原子は、強固な再結合ボンド(ペアリング)を起すことが、本論文による計算で明らかになっている。見出された再結合ボンド長は、ゲルマニウムの理想的ボンド長に比べて12-14%長いだけであり、薄膜全体に印加されているこの方向の圧縮歪が、ペアリングを助長していることが判明した。この強固なペアリングにより、単原子空孔の生成エネルギーは、歪のない場合のそれに比べ、30%-48%減少することが明らかになった。さらに、界面近傍各原子層での単原子空孔の生成エネルギーは、シリコン基板層に近づくほど、上昇することも見出され、これはシリコン・ダングリングボンドのエネルギーが、ゲルマニウム・ダングリングボンドのそれに比べて高いためであることが明らかとなった。複原子空孔、三原子空孔においては、このエネルギー的に有利な、〈110〉方向ペアリングが助長されるような原子配置が、エネルギー的に安定であることが発見された。さらに、歪のない場合には、複原子空孔、三原子空孔は大きな結合エネルギーをもつのに対し、歪下では結合エネルギーが大きく減少し、単原子空孔がエネルギー論の観点から、最も重要な欠陥であることが結論づけられている。

現実の電子デバイスでは、その構造に依存して、様々な圧縮歪がゲルマニウム薄膜に印加される。その状況での原子・電子構造の微視的側面を調べるため、本論文では、ゲルマニウム結晶に[001]面内の双軸性圧縮歪、〈110〉方向の一軸性圧縮歪、〈100〉方向の一軸性圧縮歪を、それぞれ印加した場合の、ゲルマニウム単原子空孔の原子構造、電子状態、生成エネルギーが、詳細に計算されている。最も驚くべき結果は、これらの単原子空孔によって誘起される電子状態が、多くの場合、エネルギーギャップ中に、深い準位(deep level)を形成しないことである。通常歪のない状況では、原子空孔は周囲原子のダングリングボンドを生み出し、それに起因する電子状態は、エネルギーギャップ中に深い準位を形成する。ところが圧縮歪下での原子空孔は、強固なペアリング形成により、このダングリングボンド状態は結合状態と反結合状態に分裂し、さらには圧縮歪下でのエネルギーギャップの減少により、ギャップ中から電子準位が消滅するということが、初めて見出された。本論文ではさらに、様々な圧縮歪下、様々な荷電状態での単原子空孔の原子・電子構造が詳細な計算によって明らかになっている。

圧縮歪下での原子空孔の振る舞いは実験的には明らかとなっていない。本論文では、将来における実験データの出現を期待し、欠陥による局在振動モードの振動数計算、電子スピン共鳴実験における超微細構造テンソルとその主値計算が実行されている。得られた計算結果は十分な定量性を有している。

審査の結果の要旨

本研究は、半導体科学と工学において極めて重要な、圧縮歪下でのゲルマニウム薄膜中での原子空孔の電子・原子構造を、密度汎関数理論に立脚した、量子力学の第一原理に基づくシミュレーションにより、明らかにしたものである。原子空孔周囲の原子の顕著なペアリング緩和、それにともなう生成エネルギーの減少、深い電子準位の消失が理論的に初めて見出されている。圧縮歪下におけるゲルマニウム薄膜の電子物性制御に関する科学的基礎を与えるものと評価できる。さらに実験的に測定可能な物理量の予測値を提示し、今後の半導体科学分野の学術的貢献に資するところ大であると判断される。また世界的にみても、高水準の研究といえる。

よって、著者は博士（理学）の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。