

令和元年6月20日現在

機関番号：82645

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2015～2018

課題番号：15K04671

研究課題名（和文）最高速CPU開発に向けた高品質バルク混晶シリコンゲルマニウム単結晶育成方法の確立

研究課題名（英文）High quality bulk-SiGe single-crystal growth methods for high-speed CPU

研究代表者

荒井 康智（Arai, Yasutomo）

国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構・有人宇宙技術部門・主任研究開発員

研究者番号：90371145

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,900,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、近年性能限界が明らかになってきたCPUのSiトランジスタより更に移動度が高い、CPU高速動作が可能なSiGeトランジスタに利用する高品質SiGe結晶育成方法を研究した。主な課題は、Si種子結晶からSiGeが育成する際に、SiとSiGeの熱膨張率差でSiGe結晶に発生するモザイク構造を抑制する事であった。

研究の結果、熱膨張率差緩和を期待したSiGe結晶を種子結晶とする方法は、成長SiGe結晶に多結晶が多くみられ、高品質化が困難である可能性が高いことが判り、新しくダブルゾーンでの解決方法を模索する事とした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

高速CPU開発は、今後の高速移動体通信や処理速度の速い小型PCには必須の機器であり開発が渴望されている。SiGe結晶の高品質結晶は、高速CPUを実現する次世代の結晶候補であり、インテルなどのトランジスタにも部分的に利用されているが、高品質結晶が得られれば更なる高速化が期待される。現在、高品質SiGeの量産に成功している企業はなく、本研究の成果が結実すれば、電子デバイス産業の一翼を担うことができる。

研究成果の概要（英文）： We studied high quality bulk SiGe crystals applying for the high-speed transistor using travelling liquidus zone methods. Hole mobilities of SiGe crystals are higher than that of the Si crystals. A grown SiGe crystal on Si-seed usually occurred mosaic structures due to the difference in thermal expansion between the Si and SiGe. The SiGe-seed crystals did not produce single SiGe crystals because might be caused by constitutional supercooling. We try a new double zone method: a seed crystal is sandwiched by liquidus zone. The zone under the seed will be melt the seed with SiGe growing.

研究分野：結晶工学

キーワード：SiGe 結晶成長 電子材料

様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

・最高速CPU開発を目指した歪(ひずみ)Ge膜研究の現状

SiGe 単結晶基板を利用した歪 Si-nMOS と歪 Ge-pMOS の CMOS (図 1) は、これまでのシリコンテクノロジーが活かされること、更に Ge のホール移動度は既知物質中で最高であり、移動度が結晶格子の歪(ひずみ)に比例して向上するため、最高速 CPU に最適な構造と考える。図 1 で $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ 組成を基板とした場合、基板の格子定数は Ge と約 2%異なるため、Ge 膜の結晶格子は歪む。この歪 Ge 膜では、無歪 Si 膜の約 10 倍の超高ホール移動度 ($\sim 5,000 cm^2/Vs$) が理論予測されている。然し、既存 SiGe 薄膜結晶は Si 基板上の成膜品で、徐々に Ge 組成を増やすバッファ層利用でも、結晶方位がずれるモザイク構造 (図 2) や転位抑制が困難で、理論移動度に到達する良質な歪 Ge 膜は実現していない。

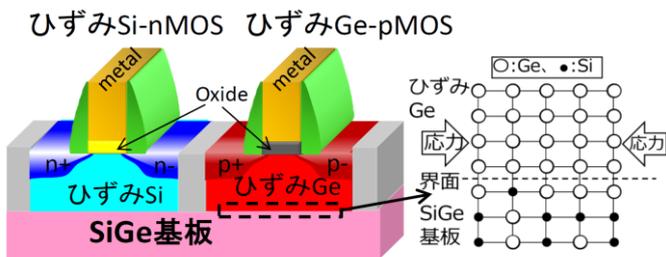


図1. ひずみSi,ひずみGe高速CMOS概念図(左)及び SiGe基板/界面/ひずみGe結晶格子概念図(右)

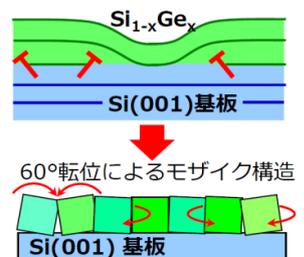


図2. Si基板上の薄膜SiGeモザイク構造概念図

・歪 Ge-pMOS、歪 Si-nMOS 基板用の均一組成バルク混晶 SiGe 単結晶育成の現状

良質かつ均質な歪 Ge 膜の育成には、SiGe 単結晶基板の組成均一性、低転位が重要である。バルク混晶 SiGe 結晶の成長軸・径両方向の組成均一化と単結晶化は、JAXA 開発 (特許第 4239065 号) の TLZ (Travelling Liquidus Zone) 法が最も有望で、 $\Phi 50mm$ では部分的にロッキングカーブ半値幅 $72 arcsec$ の良質な $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ (組成バラツキ $\pm 2\%$) 単結晶 (図 3) が育成されている。Si-Ge 合金等の完全固溶体である混晶系では、融点が組成に対して連続的に変化するため、成長界面の組成均一化には、界面形状・組成・温度勾配の関係把握に加えて、融液濃度分布の維持が必要である。TLZ 法の特長は、この融液濃度分布を飽和溶解帯形成によって制御し、種子から直接均一組成結晶を育成することである (図 4)。バルク SiGe 育成の先行研究では、界面組成分布、融液濃度分布維持に有効な対策が取られず、均一組成結晶育成は困難であった。更に、バルク SiGe 結晶の低転位化や種子からの (110), (111) 劈開抑制については殆ど研究が進んでいない。

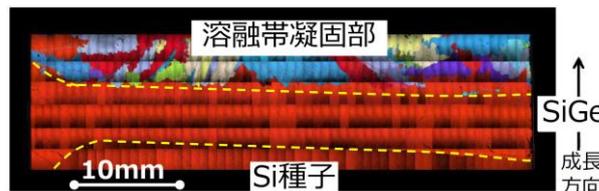


図3. $\Phi 50mm$, Si種子/ $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ 単結晶/溶融帯断面EBSD写真(同色は同結晶方位、上下点線間がSiGe単結晶)

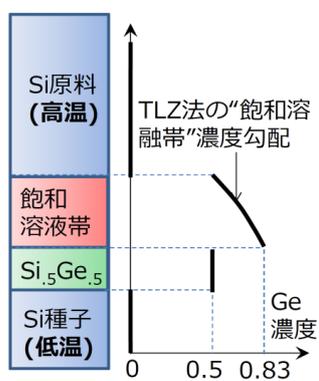


図4. TLZ法の試料構成と飽和融液中のGe濃度分布 ($Si_{0.5}Ge_{0.5}$ 育成時)

2. 研究の目的

- 1) SiGe 単結晶の転位・劈開抑制に最適な SiGe 種子組成選択法を明らかにする
- 2) SiGe 単結晶の組成均一成長界面を与える成長条件範囲を明らかにする
- 3) SiGe 単結晶合金のホール移動度の組成依存性を明らかにする

3. 研究の方法

最高速CMOSの基板結晶となる、高品質バルクSiGe単結晶育成法確立に向けた計画概要を示す。

1) SiGe単結晶の転位・劈開抑制に最適なSiGe種子組成選択法の提案

異なる組成のSiGe種子を育成し、劈開・転位の少ない面を種子付け面としてSiGe結晶を育成する。単結晶化が可能で転位・劈開が最小となる、最適SiGe種子組成の選定法を提案する。

2) SiGe単結晶の組成均一成長界面を与える成長条件範囲の提示

異なる成長条件において、温度ステップパルス（成長界面の組成を変化）を成長中に印加。結晶断面の反射電子像から界面を同定、組成を分析し、組成均一界面となる成長条件を提示する。

3) SiGe単結晶合金ホール移動度の組成依存性測定

SiGe合金の組成均一性・単結晶性を確認し、組成10at%刻み程度でホール移動度を決定する。

4. 研究成果

研究目的の1, 2について、最高速CPU開発に向けた高品質バルク混晶シリコンゲルマニウム単結晶育成方法として、特に、炭素容器を利用した結晶成長実験を実施して、SiGe結晶と炭素の反応、熱膨張差に伴う結晶の割れなど、結晶の高品質化に必要な基礎データを取得した。炭素容器は、主として東洋炭素、東海カーボン、イビデンの3社から高純度品を調達して、SiGe結晶の電気特性に影響を与える金属不純物を排除した容器にて結晶を育成した。（石英坩堝は酸化物が介在してSiGe結晶と石英坩堝が固着し、熱膨張率差によって結晶を破壊するために、不向きであることが分かっている）。

炭素容器とSiGe結晶の固着には、炭素容器表面の稠密さ、容器のかさ密度、介在酸化物、容器表面の平滑性が重要であることが分かった。密度は1.9程度で十分であると考えられる。しかし、酸化物が介在すると部分的な固着も認められており試料準備、特にSi原料結晶中の酸素には注意を払う必要がある。また、表面に単結晶Cをコートしたるつぼでも、部分的には、Siのみの反応が認められ、SiGe結晶の固着が著しく、原因を解明中であるが、表面の平滑性が損なわれている箇所が、優先的にSiGe融液中のSiと反応して、るつぼとの反応が進んだと考えられる。また、炭素容器とSiGe融液との反応について、Siをほとんど含まないSi1Ge99組成程度の融液から成長する、Si5Ge95結晶を育成して、固着の程度を調査した。結果は、Siリッチ側結晶と同様にるつぼとSiGe結晶が固着するものの、固着面積は小さく、良好なSiGe結晶の育成が可能であった。本提案で目標としていた、SiGe結晶を種子とする、クラックフリーのSiGe結晶は、Geリッチ組成側については育成できる可能性があることが分かった。

更に、育成SiGe結晶の品質を劣化させる要因として、Si種子結晶と育成SiGe結晶との間の熱膨張率差に起因するモザイク構造が挙げられる。本モザイク構造を防止する為に、熱膨張率差がより小さいSiGe結晶を種子結晶として育成する方法を提案したが、成長SiGe結晶に多結晶が多くみられ、高品質化が困難である可能性が高いことが判った。何らかの組成的過冷却が発生している可能性が高いことが判った。従って、熱膨張率差と組成的過冷却による多結晶化を根本的に解決する手法を提案した。Si種子結晶を完全に融解させる方法として、Si種子結晶とるつぼ底面との間にGeを仕込み、Si種子結晶下からもSiGe結晶を育成できるようにして、Si種子を完全に融解する。原理確認の実験では、想定通りの種子融解が確認された。

研究目的3について、文献として報告した。当初の想定通り、従来の移動度よりも非常に大きな値が得られており、SiGe結晶の高品質性が実証されたと同時に、これまでの移動度計算理論（合金散乱ポテンシャル）の見直しが必要であることが判った。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕（計3件）

1. Arai Yasutomo, Kinoshita Kyoichi, Tsukada Takao, Kubo Masaki, Abe Keita, Sumioka Sara, Baba Satoshi, Inatomi Yuko, “Study of SiGe Crystal Growth Interface Processed in Microgravity”, Crystal Growth & Design, (査読あり), vol.18, 2018, 3697~3703
2. Kyoichi Kinoshita, Yasutomo Arai, Tatsuro Maeda, Osamu Nakatsuka
“Si1-XGeX bulk single crystals for substrates of electronic devices”,
Materials Science in Semiconductor Processing, (査読あり), vol.70, 2017, 12-16
3. Tatsuro Maeda, Hiroyuki Hattori, Wen Hsin Chang, Yasutomo Arai and Kyoichi Kinoshita
“Hole Hall mobility of SiGe alloys grown by the traveling liquidus-zone method”,
Applied physics letters, (査読あり), vol.107, 2015, 152104

〔学会発表〕（計7件）

1. Y. Arai, K. Kinoshita, T. Tsukada, K. Abe, S. Sumioka, M. Kubo, S. Baba, T. Maeda, Y. Inatomi, “Homogeneous bulk SiGe crystals grown on board the International Space Station”, ICCGE-18, 2016年08月07日~2016年08月12日, 名古屋国際会議場
2. 木下 恭一、荒井 康智、稲富裕光、塚田隆夫
“TLZ 法による SiGe 結晶育成中のメルト内対流効果”, 第77回応用物理学会秋季学術講演会、2016年09月13日~2016年09月16日, 新潟市朱鷺メッセ
3. 木下 恭一、荒井 康智、稲富裕光、塚田隆夫
“TLZ 法による SiGe 結晶育成”、第77回応用物理学会秋季学術講演会、2016年09月13日~2016年09月16日, 新潟市朱鷺メッセ
4. Tatsuro Maeda, Hiroyuki Hattori, Wen Hsin Chang, Yasutomo Arai and Kyoichi Kinoshita
“Hall hole mobility of single crystalline random SiGe alloys”, 9th International Conference on Silicon Epitaxy and Heterostructures (国際学会), 2015年05月17日~2015年05月22日, Montreal, Quebec, Canada
5. 木下 恭一、荒井 康智
“TLZ 法を利用した均一組成バルク SiGe 結晶 (1) 大口径化と高品質化”、応用物理学会, 2016年03月19日~2016年03月22日, 東京工業大学
6. 前田辰郎, 服部浩之, Wen Hsin Chang, 木下恭一、荒井康智
“TLZ 法を利用した均一組成バルク SiGe 結晶 (2) 移動度評価”, 応用物理学会, 2016年03月19日~2016年03月22日, 東京工業大学
7. 荒井康智、木下恭一、阿部敬太、住岡沙羅、久保正樹、塚田隆夫、馬場嵯登史、稲富裕光
“微小重力下で TLZ 法により育成した SiGe 結晶分析”, 結晶成長学会, 2015年10月19日~2015年10月22日, 北海道大学

〔図書〕（計0件）

〔産業財産権〕

○出願状況（計0件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年：
国内外の別：

○取得状況（計0件）

名称：
発明者：

権利者：
種類：
番号：
取得年：
国内外の別：

[その他]
特になし

6. 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名：前田 辰郎

ローマ字氏名：Tatsuro Maeda

所属研究機関名：国立研究開発法人産業技術総合研究所

部局名：エレクトロニクス・製造領域

職名：研究主幹

研究者番号 (8 桁)：40357984

(2) 研究協力者

研究協力者氏名：

ローマ字氏名：

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。