

平成 22 年 6 月 2 日現在

研究種目：若手研究 (B)

研究期間：2008 ~ 2009

課題番号：20760020

研究課題名 (和文) Ge/Si ヘテロ構造の歪開放機構の解明と刃状転位の新機能探索

研究課題名 (英文) Strain-released mechanism and electronic properties in Ge/Si hetero-structures

研究代表者

藤本 義隆 (FUJIMOTO YOSHITAKA)

東京工業大学・大学院理工学研究科・特任助教

研究者番号：70436244

研究成果の概要 (和文)：

本研究では、Si 基板上の Ge 膜成長過程に生じる刃状転位の原子構造を提案し、第一原理量子計算を用いてエネルギー論を調べた。その結果、提案された 5・7 員環転位芯構造は安定に存在し、12 層程度 Ge 層を積むことで刃状転位が生じることを明らかにした。また、刃状転位芯が存在する Ge 表面の走査型トンネル顕微鏡像 (STM) を計算し、STM 像には転位線が見られることが分かった。

研究成果の概要 (英文)：

We investigate atomic structures and energetics of 90° dislocation cores in Ge films on Si substrate using the first-principles total-energy calculations. The dislocation core structure consisting of five- and seven-membered Ge rings is proposed and found to be stable with increasing Ge overlayers. The scanning tunneling microscopy images of 90° dislocation core structure are calculated and show the possibility to observe the proposed core structure.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	1,100,000	330,000	1,430,000
2009年度	900,000	270,000	1,170,000
年度			
年度			
年度			
総計	2,000,000	600,000	2,600,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎、薄膜・表面界面物性

キーワード：計算物理、ナノ材料、半導体物性、結晶成長

1. 研究開始当初の背景

Si 基板上の Ge 成長は、通常二次元層状成長から三次元アイランド成長へと移行する Stranski-Krastanov (SK) 様式が知られている。このような Ge/Si ヘテロ構造の成長

過程で生じる特徴的な形態を利用して、新たな機能を持った電子・光電子デバイスの作製を目指した研究が盛んに行われている。その一つとして、SK 成長に起因する Ge アイランド構造を積極的に利用して、そ

れらを量子ドットとして応用した新奇デバイスの開発が期待されている。一方、アイランドの形態とは対極的な関係ともいえる Ge 平坦膜を Si 基板上に作製する研究が報告されている。これは、Si 基板と Ge 平坦膜の界面近くに、歪を緩和するための刃状転位の導入により、Ge のアイランド化が抑制され、Ge の平坦膜が実現される。一般に Ge バルクのキャリア移動度が Si バルクより高いことから、Si 系半導体デバイスにおける metal-oxide-semiconductor field-effect transistor(MOSFET)などチャンネル領域へ応用することで、次世代高速デバイス開発への期待が高まっている。このように、Ge/Si 系の次世代ナノスケールデバイス開発への期待が高まっているにも関わらず、Si 基板上の Ge 層成長のメカニズムは十分理解されているとは言い難い。新たな機能を持ったデバイス作製を実現するには、Si 基板上の Ge 層の成長過程と、作製された Ge/Si 系構造の基礎電子物性とを明らかにすることが必要不可欠である。これまで Ge/Si 系ヘテロ構造の理論計算に関して、Ge アイランドに関連した報告はほとんど知られていなかった。

2. 研究の目的

本研究の目的は、Si 基板上の Ge 膜中に生じる刃状転位の生成メカニズムと刃状転位の基礎電子物性を明らかにし、電気的・光学的な新機能発現の可能性を探索することにある。

3. 研究の方法

本研究を推進するためには、高精度高速計算を実行できる第一原理量子計算シミュレーションツールと、それらを実行するための計算機リソースを必要とする。「大規模高速量子シミュレーション技術の開発」プロジェクトにおいて、10,000 原子群の第一原理密度汎関数計算を目指したシミュレーションツールの開発が行われている。このシミュレーションツールは、本研究で想定される数千原子群程度の大規模計算に威力を発揮するもの期待される。本研究では、シミュレーションツールとして、この第一原理実空間密度汎関数計算シミュレーションツールを採用する。また、本計算ツールは東大物性研コンピュータ SR11000 上で、1CPU あたり約 3 GFLOPS の性能を発揮しており、並列化効率 60% 程度のパフォーマンスを有している。

4. 研究成果

(1) 通常、Si 基板上に積層される Ge 膜には、4% 程度の圧縮ひずみが生じる。そのため、

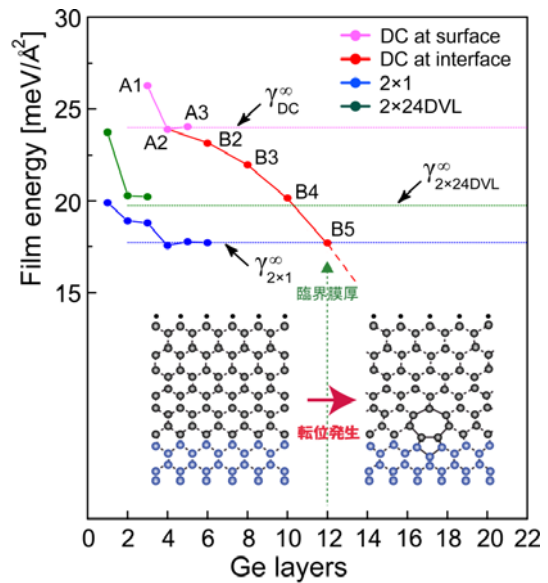


図 1. フィルムエネルギーダイアグラム

Ge の化学ポテンシャルを圧縮されたバルクのそれとして選ぶと、図 1 の 2×1 線にあるように Ge 層の数を増加していくと、ある一定値に近づくことが分かる。これは、Ge 圧縮バルクに近づいていることを意味しているため、Ge 層が積まれると歪みエネルギーが蓄積されているためである。一方、Ge/Si 界面近傍に生じる刃状転位の転位芯の原子構造として、5 員環と 7 員環のペアからなる構造を考える。この提案されている刃状転位の転位芯構造を Ge/Si 界面近傍にもつ Ge 膜のフィルムエネルギーを考える。この場合では、Ge 層の増加とともに、フィルムエネルギーが減少していく様子が見られる。このように、5-7 員環に存在することにより、歪みよるエネルギーが開放されていることが分かった。また、これらのフィルムエネルギーの結果から、刃状転位が発生する臨界膜厚は、12 層であることが明らかになった。

(2) 一般に異種物質界面に存在する欠陥構造を測定することは極めて難しい。そのため、Ge/Si 界面近傍に存在する転位芯の原子構造は詳しく知られていない。本研究では、(1) に示したように 5-7 員環構造を提案することにより、エネルギー論を明らかにした。ここでは、さらに発生した転位芯の原子構造を決定するための方法として、走査型トンネル電子顕微鏡 (STM) を用いることを提案する。図 2 には、刃状転位の発生している場合での Ge 表面の STM 像を示している。図 2 (a) と (b) には、それぞれ印加電圧 -0.5V と +0.5V での条件下における STM 像を示してある。図 2 (a) から、転位芯構造がある上

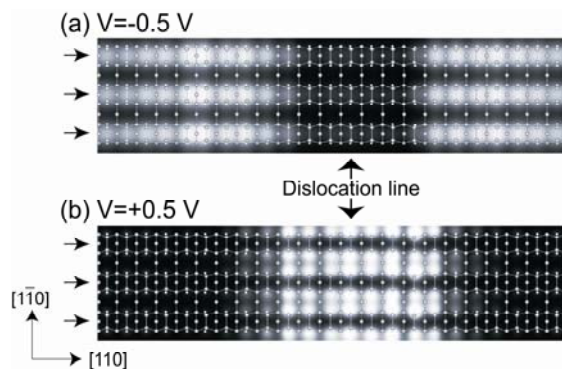


図 2. 走査型トンネル電子顕微鏡のシミュレーション像

方では、暗い転位線が $[1-10]$ 方向に沿って走っていることが分かる。一方、図 2 (b)においては、(a)とは異なり、明るい転位線が見られる。このように、STM で Ge 表面を観測することで、転位線を原子レベルで発見することが可能であると期待される。また、印加電圧の条件を変化させることで、転位線が暗いあるいは明るい線として、観測できることが分かった。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 2 件)

- ① Yoshitaka Fujimoto and Atsushi Oshiyama, Atomic structures and energetics of 90° dislocation cores in Ge films on Si (001), Physical Review B, 205309-1-205309-5, Vol. 81, 2010, 査読有
- ② Yoshitaka Fujimoto, Takashi Koretsune, Susumu Saito, Takashi Miyake, and Atsushi Oshiyama, A new crystalline phase of four-fold coordinated silicon and germanium, New Journal of Physics, Vol. 10, 083001-1-083001-8, 2008, 査読有

[学会発表] (計 11 件)

- ① 藤本義隆、斎藤晋、窒素ドーパされたカーボンナノチューブのエネルギー論と電子特性-不純物密度の観点から-, 日本物理学会第 65 回年次大会、岡山大学、2010 年 3 月 20 日
- ② 藤本義隆、斎藤晋、窒素ドーパ型カーボンナノチューブのエネルギー論と電子

状態、第 38 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム、名城大学、2010 年 3 月 2 日

- ③ 藤本義隆、斎藤晋、窒素ドーパ型カーボンナノチューブのエネルギー論と電子構造; 東京工業大学グローバル COE プログラム「ナノサイエンスを拓く量子物理学拠点」公開シンポジウム 2009、東京工業大学、2009 年 12 月 9 日
- ④ 藤本義隆、斎藤晋、三量体ピリジン型欠陥をもつカーボンナノチューブの構造安定性と電子構造、日本物理学会 2009 年秋季大会、熊本大学、2009 年 9 月 25 日
- ⑤ 藤本義隆、斎藤晋、ピリジン型欠陥をもつカーボンナノチューブの原子・電子構造、第 37 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム、つくば国際会議場、2009 年 9 月 2 日
- ⑥ Y. Fujimoto, T. Koretsune, S. Saito, T. Miyake, and A. Oshiyama, Atomic structure and electronic property of new crystalline Si and Ge, International Symposium on Nanoscience and Quantum Physics, 2009 年 2 月 25 日、Tokyo
- ⑦ 藤本義隆、岩田潤一、押山淳、第一原理計算による Si/Ge 膜中の原子・電子構造、日本物理学会 2008 年秋季大会、2008 年 9 月 23 日、岩手大学
- ⑧ 藤本義隆、是常隆、斎藤晋、三宅隆、押山淳、シリコンとゲルマニウムの四配位新物質、日本物理学会 2008 年秋季大会、2008 年 9 月 23 日、岩手大学
- ⑨ Y. Fujimoto, T. Koretsune, S. Saito, T. Miyake, and A. Oshiyama, Atomic geometry and electronic structures of new crystalline Si and Ge, The 11th Asian Workshop On First-Principles Electronic Structure Calculations, 2008 年 11 月 4 日、Taiwan
- ⑩ Y. Fujimoto and A. Oshiyama: Formation and Stability of Dislocation cores in Ge/Si(001) Heterostructures, 1st International Conference of The Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nanoscience, 2008 年 6 月 4 日、Tokyo
- ⑪ Y. Fujimoto, T. Koretsune, S. Saito, T. Miyake, and A. Oshiyama, Structural and electronic properties of new crystalline phase of Si and Ge, International Conference on Quantum Simulators and Design 2008, 2008 年 6 月 2 日、Tokyo

6. 研究組織

(1) 研究代表者

藤本 義隆 (FUJIMOTO YOSHITAKA)
東京工業大学・大学院理工学研究科・特任
助教
研究者番号：70436244

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし