

X線非弾性散乱法による歪 SiGe のフォノン分散測定 Phonon Dispersion Measurements for Strained SiGe by Inelastic X-ray Scattering

小瀬村 大亮^a, 武内 一真^a, 横川 凌^a, 臼田 宏治^b
Daisuke Kosemura^a, Kazuma Takeuchi^a, Ryo Yokogawa^a, and Koji Usuda^b

^a明治大学, ^b株式会社東芝
^aMeiji University and ^bTOSHIBA CORPORATION

フォノン散乱は固体電子デバイスの輸送特性を決める重要な機構の一つであり、詳細なフォノン散乱機構を議論するためには材料のフォノン分散の情報が必要である。電解効果トランジスタなどの実際の活性領域は非常に薄く、通常 2 次元モデルとして扱われるので、最表面のフォノン分散プロファイルを得ることが望まれている。本研究では、電子デバイス材料の中でも特に重要な SiGe のバルク結晶、および歪み薄膜について X 線非弾性散乱測定を行った。その結果、SiGe の明瞭なフォノン分散が得られた。さらに、すれすれ入射 X 線配置を組み合わせることにより歪み SiGe 薄膜からの非弾性散乱を確認した。

キーワード： フォノン分散, 歪み SiGe, X 線非弾性散乱

背景と研究目的：

スケーリング技術による高性能化限界が議論されるトランジスタのチャネル材料開発において、チャネルに歪みを導入してデバイスの高性能化を計る歪み導入技術が注目されている[1,2]。この数年においては、既に、研究レベルのみならず実製品への技術の実装が実現しており、デバイスの発展に非常に重要な役割を果たしてきた[3,4]。この歪み技術は、当初 Si 材料の上で培われたが、これと共に歪みと物性の理解が進み、今日では Ge や III-V 化合物などの次世代チャネル材料への積極的な歪み導入が検討され、その効果が検証されるようになってきている[5-8]。

歪み導入によるトランジスタの特性改善効果は、キャリア移動度を指標として議論されることが多い[9]。このキャリア移動度を決定する要因の 1 つは有効質量であり、電子バンド構造の曲率から見積もることができるので、電子状態計算による研究が多々報告されている[10,11]。一方、もう 1 つの決定要素はキャリア散乱である。その中でも支配的な散乱機構の 1 つが、フォノン散乱であり、特に歪み導入後の移動度を議論する場合、無歪みでは散乱確率のなかった光学フォノン散乱を考慮しないとトランジスタ特性を説明できないなど、事情は複雑であり慎重かつ精密な理解が肝要である[12-14]。このような詳細なフォノン散乱機構を議論するためには材料のフォノン分散の情報が必要不可欠である。

本研究では、上述したトランジスタチャネル材料だけではなく、熱電変換材料などの電子デバイス材料として特に重要な SiGe のバルク結晶、および歪み薄膜の非弾性散乱にチャレンジした。トランジスタのチャネルとして利用される歪み層は、素子性能の向上と共に薄膜化し、今や sub-100 nm レベルに到達している。従って、歪みとフォノン散乱機構の相関関係を考える上で、薄膜の非弾性散乱解析が不可欠である。しかしながら、通常の X 線非弾性散乱の実験で薄膜を測定する配置は想定されておらず、従来に無い新手法の適用が必須である[15,16]。そこで本実験では、X 線回折で薄膜を測定する際に多々使われるすれすれ入射の配置を X 線非弾性散乱と組み合わせる試みを行った。

実験：

試料としてバルク SiGe 結晶、および Ge 基板上に堆積された膜厚 35 nm の歪み SiGe 薄膜を準備した。バルク試料、薄膜試料共に Ge 濃度は約 75% である。X 線のエネルギーは 17.739 keV を採用した。本実験は、そもそも測定可否を検討することが目的の試行実験と位置付けたトライアルな申請課題なので、上記試料のフォノン分散を網羅的に測定することはせず、 Γ 点から X 点ま

でのブリルアンゾーンにおける光学モードに絞って測定を実施した。即ち、逆格子点(600)周辺の光学フォノンについて、 $-10\sim 50$ meV の範囲での走査を行った。

膜厚 35 nm の薄膜を測定するために、以下に記すすれすれ入射の配置を適用した。入射角度は 0.1 deg を狙った。Ge の場合、この入射角を採用すると X 線の侵入長は高々数ナノメートルと見積もられ、薄膜からの微弱な信号強度を取得するのが困難なことや、表面フォノン散乱の混在などが予測されるが、今回はトライアルな実験であり、厳密な配置を目指すには別途検討を要する。一方、すれすれ入射の配置で効率的な実験を行うための施策として、KB ミラーを利用してビームサイズを約 83 μm (縦方向), 15 μm (横方向) に集光する工夫をした。その他、背面反射光学系を採用した非弾性散乱分光器、アナライザ、多軸回折系、等を用いた。

結果および考察：

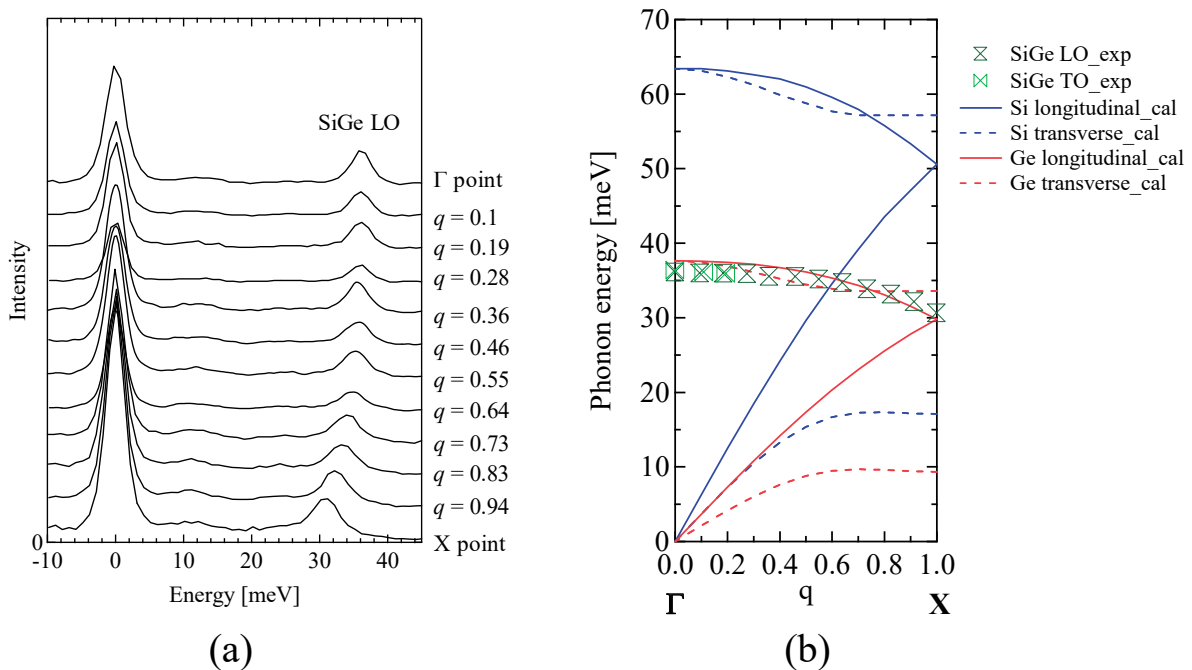


図 1 (a) バルク SiGe 結晶の Γ 点から X 点までの非弾性散乱スペクトル, (b) バルク SiGe のフォノン分散 (比較のために ab-initio で計算した Si, Ge のフォノン分散をプロットした: 実線が縦光学および音響モード、点線が横光学および音響モード)。

図 1 (a)に、バルク SiGe 結晶の Γ 点から X 点までの非弾性散乱スペクトルを示す。図で見られるように、SiGe の縦光学 (LO) フォノンエネルギーが、約 36 meV (Γ 点) から約 31 meV (X 点) に変化する明確なフォノン分散を観測した。図 1 (b)に、SiGe LO スペクトルのピーク位置からフォノンエネルギーをプロットして得られたバルク SiGe のフォノン分散を示す。 Γ 点付近の SiGe 横光学 (TO) フォノンエネルギーについてもプロットした。また、比較のため、ab-initio で計算した Si, Ge のフォノン分散についても併せて示す。図より、本実験で得られた SiGe の LO フォノン分散は、計算で得られた Ge の LO フォノン分散に近いプロファイルを示したが、より広いブリルアンゾーン、今回未測定の声響モード、SiGe の電子バンド構造との対応、さらには単体では見られない混晶系特有の複雑なフォノンモード等、SiGe のフォノン分散から有意な情報を抽出するために多くの課題がある。

一方、すれすれ入射 X 線配置を適用して歪み SiGe 薄膜の X 線非弾性散乱を行った結果、基板からの信号とは分離された非弾性散乱スペクトルを確認した。得られた薄膜非弾性散乱スペクトルで、0 meV から 30 meV のエネルギー領域にブロードなピークと数本のシャープなピークが観測された。SiGe の光学フォノンに対して低エネルギー側に位置するこれらのピークは、音響モードと表面フォノンに起因したピークが重畳したものと考えられる[17,18]。

今後の課題：

フォノン分散に関する情報は、材料物性において基礎的なパラメータであり、本実験で得られた SiGe のフォノン分散は、冒頭で記述した種々電子デバイスの性能を決定する上で重要となる。さらに、電子状態計算が扱うモデルの検証材料としてもフォノン分散の情報は有益である。Si や Ge 単体の結果から、SiGe のフォノン分散を直接導くことは困難であり、数々の報告がある Si, Ge 単体のデータに加えて、本実験で得られた SiGe の情報が加われば混晶系モデルの計算精度向上に資することができる。

このような観点で、今回提案、実施したバルク SiGe 結晶、および歪み SiGe 薄膜の X 線非弾性散乱の測定精度向上、広いブリルアンゾーン領域に渡るフォノン分散の体系的なデータ取得、並びに、取得データの詳細な解析によるデバイス輸送特性機構の提案が急がれる。

謝辞：

国内では類を見ない薄膜 X 線非弾性散乱実験において評価手法の検討から測定技術に至るまで全面的にサポート頂きました、高輝度光科学研究センターの廣沢一郎氏、筒井智嗣氏、内山裕士氏、佐藤真直氏の各位に、感謝致します。

参考文献：

- [1] M. L. Lee et al., *Appl. Phys. Rev.* **97**, 011101 (2005).
- [2] Y. Sun, S. E. Thompson, and T. Nishida, *Strain Effect in Semiconductors*, Springer, New York, 2010.
- [3] S. Zaima, *Jpn. J. Appl. Phys.* **52**, 030001 (2013).
- [4] 若林整、応用物理、**82**, 292 (2013).
- [5] K. Ikeda et al., *ECS Transaction* **64**, 347 (2014).
- [6] H. Arimura et al., *IEDM Tech. Dig.*, p.588 (2015).
- [7] Takagi et al., *IEEE Trans. Electron Devices* **55**, 21 (2008).
- [8] N. Waldron et al., *Solid-State Electron.* **115**, **81** (2016).
- [9] S. Takagi et al., *IEDM Tech. Dig.* p.398 (1988).
- [10] J. M. Luttinger and W. Kohn, *Phys. Rev.* **97**, 869 (1955).
- [11] D. J. Chadi and M. L. Cohen, *Phys. Stat. Sol. (b)* **68**, 405 (1975).
- [12] S. Takagi et al., *J. Appl. Phys.* **80**, 1567 (1996).
- [13] E. Pop et al., *J. Appl. Phys.* **96**, 4998 (2004).
- [14] S. Kawaji, *J. Phys. Soc. Jpn.* **27**, 906 (1969).
- [15] H. Uchiyama et al., *Phys. Rev. B* **81**, 241103 (2010).
- [16] B. M. Murphy et al., *Phys. Rev. Lett.* **95**, 256104 (2005).
- [17] W. Stigler et al., *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1090 (1997).
- [18] K. Takeuchi et al., *Appl. Phys. Express* **9**, 071301 (2016).