

第一原理電子構造計算によるSi基板上的Ge膜成長機構

東京工業大学大学院理工学研究科物性物理学専攻 氏名 藤本 義隆

目的 密度汎関数理論に基づいた第一原理電子構造計算法を用いて半導体Si基板上的Ge膜成長過程における歪み開放機構と刃状転位の転位芯構造・電子特性の解明を行なう。

内容 半導体Siのスケーリングによる性能向上の限界が指摘されてきている昨今、Si基板にGe膜を作成し、これを高性能デバイスへと応用する試みがなされている。しかしながら、GeとSi間に生じる圧縮歪みを開放するために、転位が発生することが報告されている。転位の形成は、Ge膜質の劣化、さらにはデバイスの性能を劣化させる要因となるものと考えられる。そのため、この転位とくに転位芯の構造や生成過程を解明することが重要である。

結果 図1に示すような5-7員環から構成される転位芯構造は、Ge膜が十分に厚く積まれても壊れることなく安定な構造として存在することが分かった。Si基板上的Ge膜成長の初期段階では、圧縮されたGe膜が形成される。しかし、Geが12層程度積まると転位が発生し、蓄積された歪みエネルギーを開放することがわかった。(図2)

利用した計算機 SX-8R
CPU時間 120時間
使用メモリ 42GB
並列化 32並列

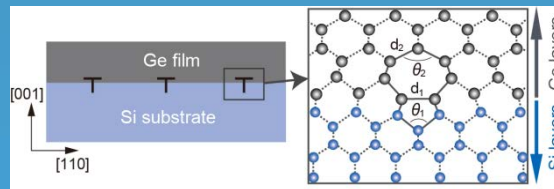


図1 Si上のGe膜と界面近傍の原子構造

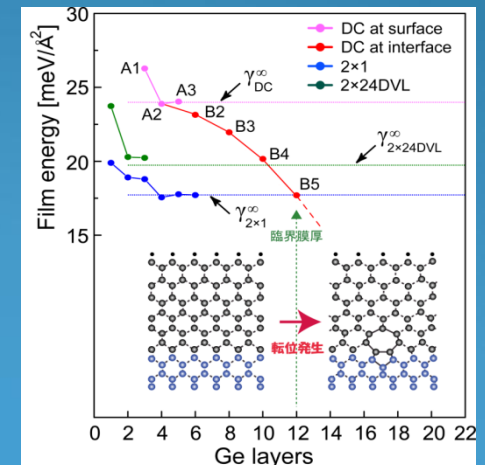


図2 Ge膜成長のエネルギーダイアグラム