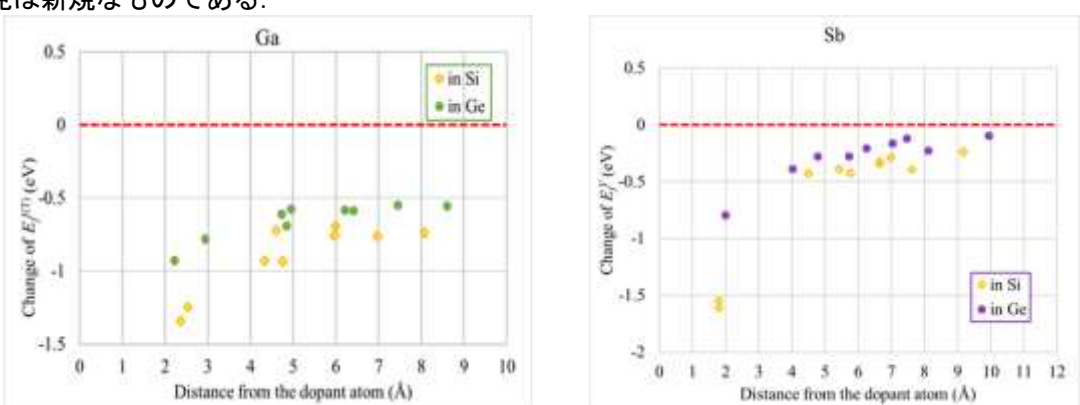


申請者	学科名	情報通信工学科	職名	教授	氏名	末岡 浩治
調査研究課題	大口径 Ge 単結晶の高品位化に関する基礎研究					
調査研究組織	氏名		所属・職	専門分野	役割分担	
	代表	末岡 浩治	情報工学部情報通信工学科・教授	応用物理学	研究全般・第一原理計算	
	分担者	中村 浩三 泉妻 宏治 Jan Vanhellemont	地域共同研究機構・客員教授 グローバルウェアズ・ジャパン社・副部長 アントワープ大学(ベルギー)・客員教授	材料工学 半導体工学 半導体物性	計算結果の議論 実験の検討と実施 計算結果の議論	
調査研究実績の概要	<p>1. 研究背景と目的</p> <p>半導体ゲルマニウム (Ge) 単結晶は、キャリア (電子と正孔) の移動度がシリコン (Si) より大きく、集積回路用として優れた材料である。今後、Ge 単結晶をウェーハや薄膜として実用するにあたり、Si 単結晶で行われている点欠陥の精密制御が必要となる。当方は2012年から本学独創的研究助成費を受け、「直径450 mm Si結晶における点欠陥の制御技術開発に関する基礎研究」を行ってきた。この研究は2013~2015年度までの3年間、科研費基盤研究にも採択され、産業界においてSi結晶の高品位化に貢献してきた。さらに最近、添加物 (ドーパント) を高濃度に含むエピウェーハにまで本研究を展開しており、ドーパントがSi結晶の品質に与える影響も解明した。</p> <p>本研究においては、Si結晶に関して行ってきた研究をGe結晶に適用する。手法として第一原理計算を用い、ドーパントならびに熱応力がGe結晶中の点欠陥挙動に与える影響を明らかにする。Si結晶はもとよりGe結晶に関するこのような研究は前例がない。従って、Ge結晶の高品位化に関する指針を与えることができれば、これは我が国における半導体産業の新たな展開を提案できる意義を持つ。</p> <p>2. 研究成果の概要</p> <p>今年度は、ドーパントがGe結晶中の点欠陥挙動に与える影響に注目して研究を行った。図1にGaドーパントが格子間Ge原子 (<i>I</i>) の、Sbドーパントが原子空孔 (<i>V</i>) の形成エネルギーに与える影響に関する計算結果を示す。これより、いずれのドーパントについても、Ge中よりSi中のほうが形成エネルギーの低下に与える効果が小さいことがわかる。この知見は新規なものである。</p>					
<div style="display: flex; justify-content: space-around;">  </div> <p style="text-align: center;">図1 格子間原子 (左図) と原子空孔 (右図) の形成エネルギー</p> <p>図1の結果を用い、融点におけるGe結晶中の点欠陥濃度のドーパント依存性を算出した結果を図2に示す。図の縦軸は<i>V-I</i>の濃度を示している。これよりC, Ga, Bの添加により<i>V-</i></p>						

Iの濃度が0になる可能性があることがわかる。デバイス性能に影響を与えないCの添加により無欠陥Ge結晶が達成できる可能性があることがわかった。

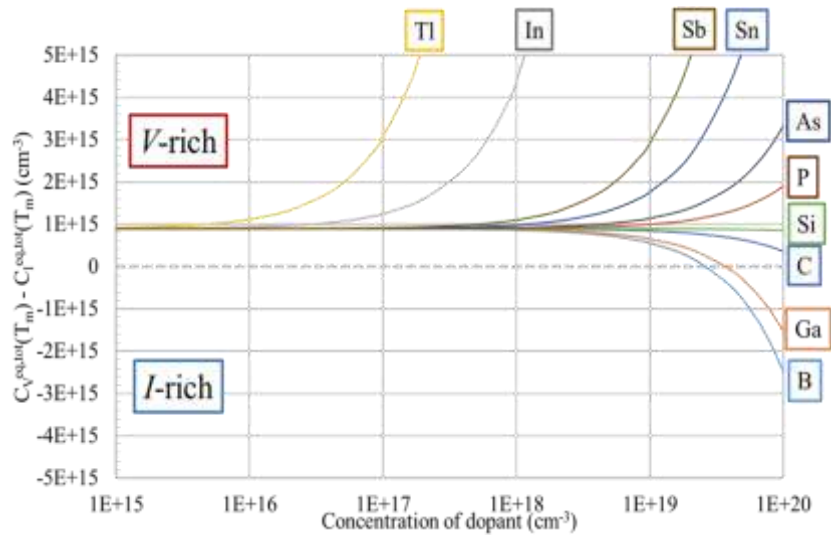


図2 Ge結晶中の点欠陥濃度のドーパント依存性

3. 研究成果および外部資金の取得状況

本研究成果を応用物理学会で発表（平成27年3月20日）するとともに、査読あり学術論文（*J. Crystal Growth*）に投稿した。なお、Si結晶に関する研究と本研究成果を部分的に含む内容について米国電気化学学会からReview論文の執筆依頼を受け、本年3月に出版した。

4. 今後の計画

大口径Ge結晶の高品位化に関する研究をさらに進める。とくに、熱応力の影響について研究することで、無欠陥Ge結晶の実現に資する。

成果資料目録

- 1) K. Sueoka, E. Kamiyama, Piotr Spiewak and J. Vanhellefont, "Review – Properties of Intrinsic Point Defects in Si and Ge Assessed by Density Functional Theory", *ECS Journal of Solid State Science and Technology* **5**, (2016) P3176-3195.
- 2) S. Yamaoka, K. Kobayashi, K. Sueoka and J. Vanhellefont, "Density Functional Theory Study of Dopant Effect on Formation Energy of Intrinsic Point Defects in Germanium Crystals", *J. Crystal Growth*, submitted for publication.