

# SiGe固溶体の局所的な歪みの第一原理計算

関学大・理工 ○谷口僚(院生), 山本洋佑, 西谷滋人  
東北大・金研 米永一郎

[緒言] SiGeは近年, 歪みSi製造用の基板として主に用いられる. 代表的な全率固溶体であるSiGeにおいて, その電子的および熱的特性は, 構成要素であるSiとGeの格子定数における4.2%の差に大きく影響される. よって, これら特性の起源を明らかにするためには, その局所的な歪み緩和を伴う原子配置に関する正確な知識が必要不可欠となる. 本研究では, その原子配置の組成依存性について第一原理計算によって調べた.

[計算手法] 本研究において, SiGe組成の異なる立体ダイヤモンド構造を持つ6種類の格子モデルを扱った. それぞれに対し, 外部・内部緩和を考慮した第一原理電子構造計算をVASPを用いて行った. 結晶の格子定数や体積の変化, 近接原子ペアのボンド長および最安定エネルギーの組成依存性を調べた.

[結果] SiGe結晶におけるGe-Ge, Si-Ge, Si-Si結合のボンド長は, 図1に示した通り, それぞれの組成でそれぞれ異なり, またSi含有率に対して線形的な依存性を示した. これは米永らの実験結果<sup>1)</sup>とほぼ一致する. しかしながらSi含有率25%のSi-Ge, Ge-Ge結合のボンド長が他の傾向から外れている. この原因を局所的な結合数変化などから検討している.

1) I. Yonenaga, M. Sakurai, M. H. F. Sluiter, Y. Kawazoe, and S. Muto, Journal of Materials Science, 16 (2005), pp. 429-432.

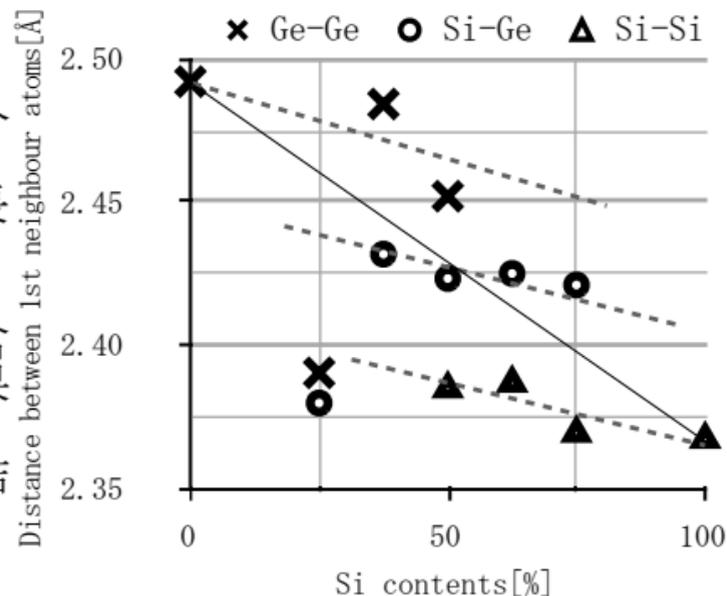


図1 SiGe結晶におけるGe-Ge, Si-Ge, Si-Si各ボンド長のSi組成依存性.