

1 化合物半導体の安定性と積層欠陥エネルギー

1.1 積層欠陥構造

半導体材料中には各種の欠陥が見られ、使用したときにリーク電流が起こり、故障の原因となることが知られている。特に転位の拡張転位 (Extended dislocation) の幅を支配する積層欠陥エネルギーは、半導体材料の欠陥生成の容易さを知る上で重要なパラメータのひとつである。その積層欠陥エネルギーと必要十分条件の関係にある積層欠陥 (Stacking fault) は周期的に積まれた層に何らかの原因によりずれが生じ、局所的に積層構造がずれてしまうことで起こる。この積層欠陥を説明するにあたり、基本結晶構造である fcc 構造と hcp 構造を用いる。図 1(a) に示すように fcc 構造の積層周期 ABCABC... に積層欠陥が入ることにより、局所的に積層周期 CACA という hcp 構造が現れる。なお、このように局所的に fcc 構造と hcp 構造をとるサイトを c と h で表記する。このような積層欠陥は、結晶成長時に生じたり、図 1 (b) に示すように、一本の完全転位 (Perfect dislocation) が二つの部分転位 (Partial dislocation) に分離して拡張転位を作るときに生じる。この二つの部分転位で囲まれた領域が積層欠陥である。また、積層欠陥エネルギーが小さいほど拡張転位の幅は大きく、すべりに対して大きな抵抗を持つ。したがって、塑性変形が積層欠陥エネルギーの大小に大きく左右されることになる。

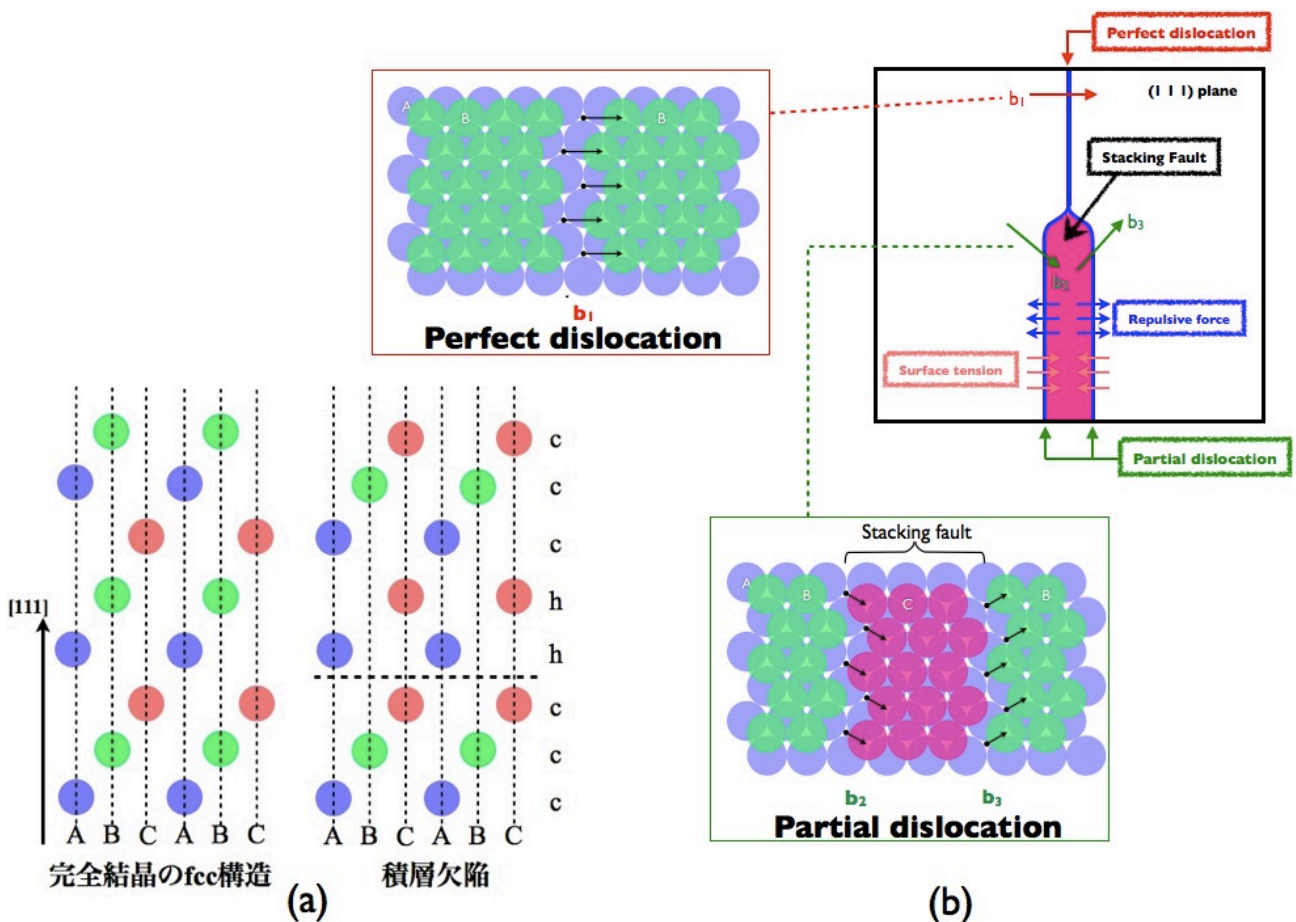


図 1: 積層欠陥構造の模式図。(a)fcc 構造中に積層欠陥が入った場合の積層周期の変化。(b) 拡張転位の原子配置。

1.2 計算モデル

以上のことから, fcc 構造と hcp 構造とのエネルギー差と積層欠陥エネルギーには相関があることが知られている. また, 四面体構造をもつ化合物半導体でも, fcc 構造の代わりに Zincblende (ZB) 構造が, hcp 構造の代わりに Wurtzite (W) 構造が対応するが, これらにもそれらの相関が報告されている. 本節では, III-V 族半導体, II-VI 族半導体から成る ZB 構造と W 構造のユニットセルを作り, 第一原理計算ソフト VASP を用いてそれぞれの構造エネルギーを求め, 構造エネルギー差 (ΔE) を求めた. 計算条件として, エネルギー差が精度よく再現されるように, カットオフエネルギーを 1000 eV に設定した.

1.3 計算結果と議論

図 2 は, 図 3 に示す実験的に得られた化合物半導体の積層欠陥エネルギーと我々が計算で求めた ZB と W との構造エネルギー差との相関を示している. 積層欠陥エネルギーは電子顕微鏡観察の部分転位の幅を, weak-beam 法あるいは高分解能像から求めている. なお, 我々が計算で求めた値は図 3 の青色の列を示す. この構造エネルギー差と積層欠陥エネルギーとは正の相関を示しており, これらの値の間に線形近似が成り立つことを期待させる. しかし, CdSe は実験的に得られている安定構造を再現していない. また, これらの相関はそれほど高くない. 実験結果との矛盾に関しては, VASP の計算精度を検討する必要がある. また, 相関が高くないという結果に関しては積層間の相互作用が単純な 2 層間の相互作用だけで決定しないことを示唆している.

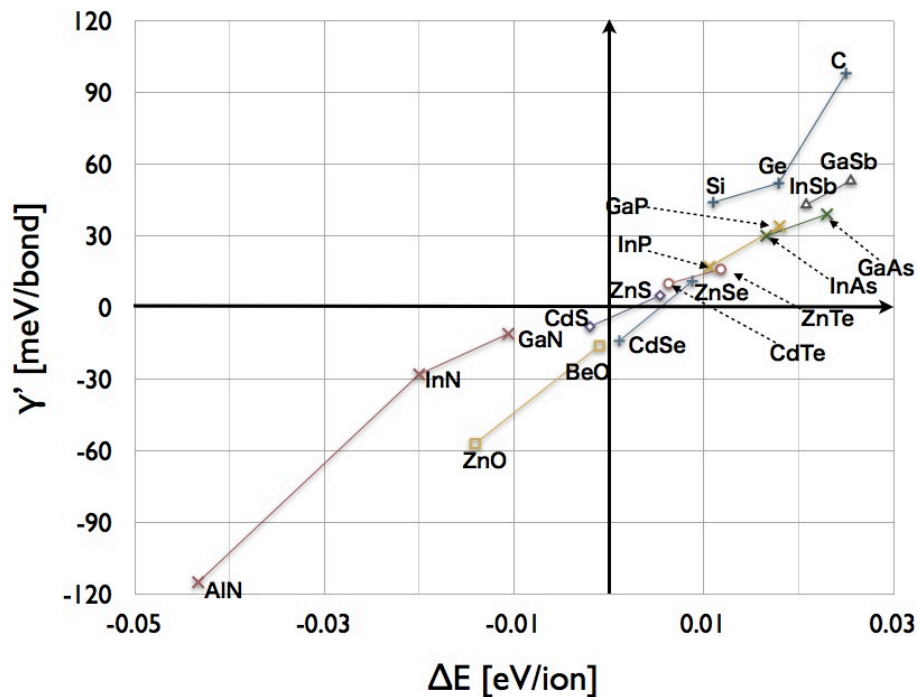


図 2: 積層欠陥エネルギー (γ') と, ZB 構造と W 構造のエネルギー差 (ΔE) との相関.

*

	stable structure	method	$\gamma(\text{mJ/m}^2)$	$\gamma'(\text{meV/bond})$	c / a	e*0/e	s	$\Delta E(\text{eV/ion})$
C	D	WB	285± 40	98± 14	1.660	0	0	0.0241
Si	D	WB	55± 7	44± 5.5	1.653	0	0	0.0106
Ge	D	WB	60± 10	52± 8.5	1.662	0	0	0.0179
GaP	Z	WB	43± 5	34± 4	-	0.24	5.53	0.0186
GaAs	Z	WB	45± 7	39± 6	-	0.20	8.69	0.0236
GaSb	Z	WB	53± 7	53± 7	-	0.15	10.21	0.0248
InP	Z	WB	18± 3	17± 3	-	0.27	3.90	0.0113
InAs	Z	WB	30± 3	30± 3	-	0.22	4.29	0.0118
InSb	Z	WB	38± 4	43± 5	1.635	0.21	7.37	0.0213
ZnS	Z	WB	≤ 6	≤ 5	1.637	0.41	-0.37	0.0056
ZnSe	Z	WB	13± 1	11± 1	1.634	0.34	1.29	0.0089
ZnTe	Z	WB	16± 2	16± 2	1.645	0.27	1.48	0.0122
CdTe	Z	WB	9± 1	10± 1	1.637	0.34	1.44	0.0073
AlN	W	HR	220± 70	115± 40	1.600	0.40	-2.76	-0.0433
GaN	W	WB	20± 3	11± 2	1.627	0.42	-	-0.0105
InN	W	HR	41± 8	28± 5	1.611	-	-	-0.02
ZnO	W	HR	100± 20	57± 11	1.603	0.53	-3.86	-0.0141
CdS	W	WB	8.7± 1.5	8.0± 1.4	1.632	0.40	-2.85	-0.0026
CdSe	W	HR	14± 5	14± 5	1.635	0.41	-2.39	0.002
BeO	W	WB	41± 9	16± 3.5	1.623	0.62	2.08	-0.010

* Ref[1] S. Takeuchi, and K. Suzuki, "Stacking Fault Energies of Tetrahedrally Coordinated Crystals," Phys. Stat. Sol., (a) 171 (1999), 99-103.

D:Diamond Z:ZincBlende W:Wurtzite
WB:Weak-Beam HR:High-Resolution

図 3: 実験的に得られた化合物半導体の積層欠陥エネルギーと, 計算結果.