

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。

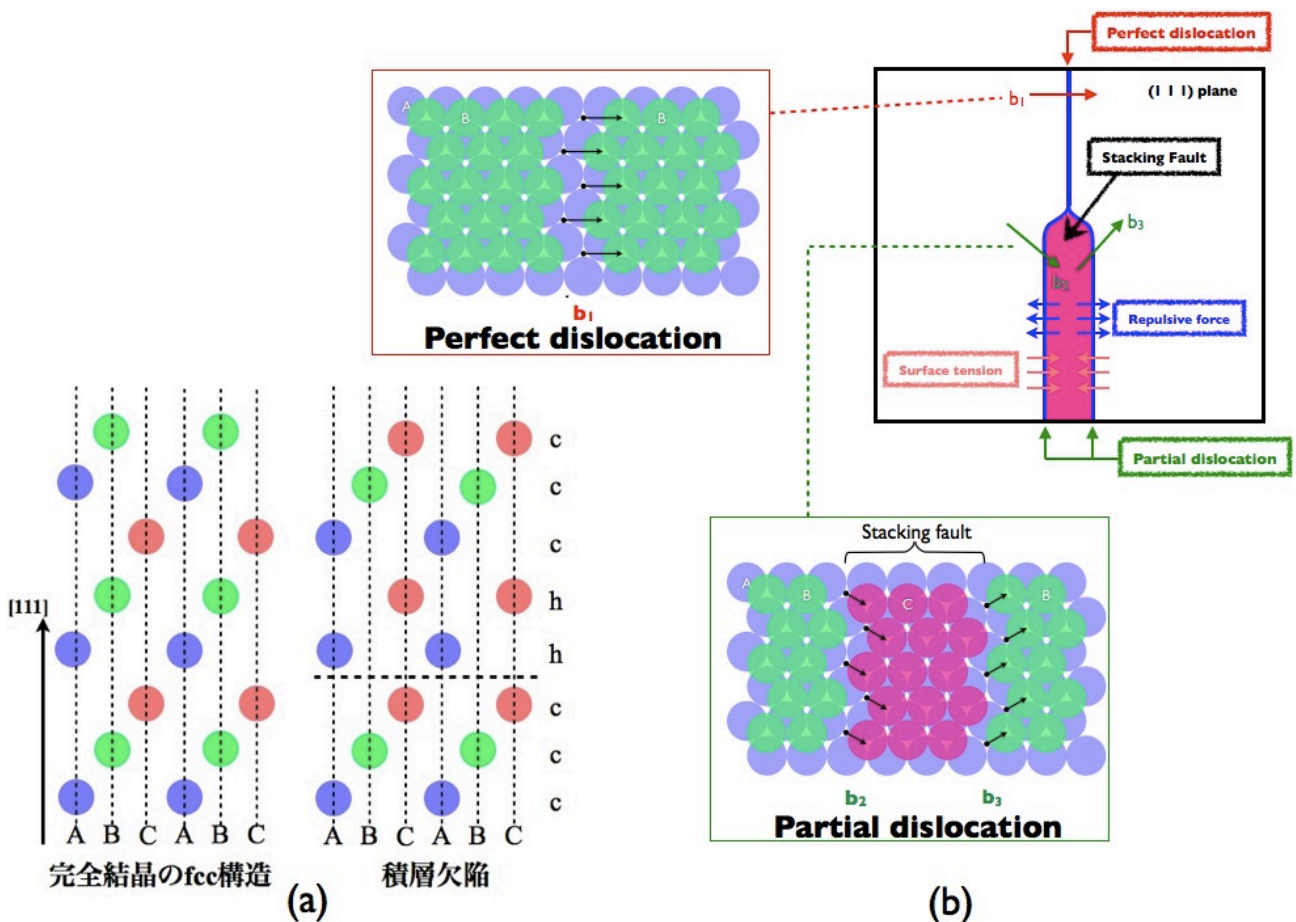


図 1: 積層欠陥構造の模式図。(a)fcc 構造中に積層欠陥が入った場合の積層周期の変化。(b) 拡張転位の原子配置。

1.2 背景

以上のことから，fcc 構造と hcp 構造との構造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については，fcc 構造の代わりに Zincblende 構造（ZB）が，hcp 構造の代わりに Wurtzite 構造（W）が対応するが，多くの半導体化合物においても同様の相関があることが知られている．

図 2 は，実験的に得られた積層欠陥エネルギー（ γ' ）と，(a) に示す有効電荷（ e^* ）および (b) に示す W の c/a 比との依存性を示している．本節では化合物半導体に焦点を絞り，実験的に報告されている γ' と，ZB と W の構造エネルギー差（ ΔE_{ZB-W} ）との依存性，および ΔE_{ZB-W} と W の c/a 比との依存性を調べ，ZB と W の安定性について検討した．

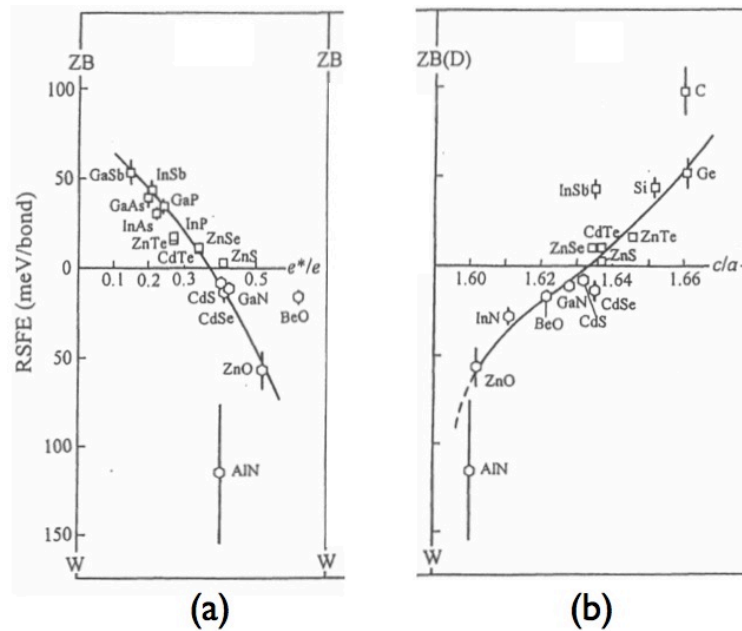


図 2: 積層欠陥エネルギー（ γ' ）との相関．(a) 有効電荷 e^* ，(b) W 構造の c/a 比．

1.3 計算モデル

III-V 族半導体，II-VI 族半導体から成る ZB と W 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エネルギーを計算し， ΔE_{ZB-W} および W の c/a を求めた．また，これらの結果から ZB と W の安定性について調べた．計算条件として，エネルギー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．

1.4 計算結果と議論

図 3 は実験的に得られた化合物半導体の γ' と，我々が計算で求めた ΔE_{ZB-W} との相関を示している． γ' 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．この結果から，まず多くの系において ΔE_{ZB-W} が 0.01 eV/ion 程度と非常に小さいことがわかる．これは ZB と W が同一の配位数をもつため，一般に配位数に依存すると知られる凝集エネルギーに差が出なかったと考えられる．また， ΔE_{ZB-W} と γ' とは正の相関を示しており，これらの値の間には，線形近似が成り立つことを期待させる．しかし，これらの相関は

それほど高くない．これは，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．そして唯一 CdSe に関しては，実験的に得られている値と正負の不一致が観察され，最安定構造を再現していない．この実験結果との矛盾に関しては，VASP の計算精度を再検討する必要がある．図 4 は，我々が計算で求めた ΔE_{ZB-W} と W の c/a 比との相関を示している．この結果より， ΔE_{ZB-W} と W の c/a 比の間には相関は高いとは言えないが線形近似が成り立つことが確認された．この結果は図 2(b) に示したように， γ' と c/a の間には相関があること，さらには図 3 の結果から， γ' と ΔE_{ZB-W} の間にも相関があることから，理解される．加えて，計算結果から ZB においては理想的な軸比 $c/a = 1.633$ よりも大きいこと，W においては小さいことが示され，実験結果と整合する．以上より， γ' と ΔE_{ZB-W} との相関性，および ZB と W の安定性は，第一原理計算により求めた ΔE_{ZB-W} や c/a からアプローチを行うことで議論できることを示唆している．

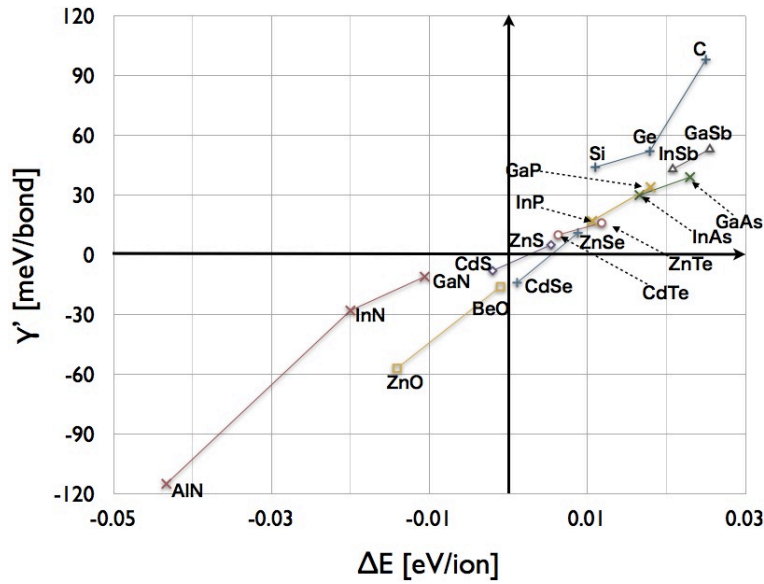


図 3: 積層欠陥エネルギー (γ') と，ZB と W の構造エネルギー差 (ΔE_{ZB-W}) との相関．

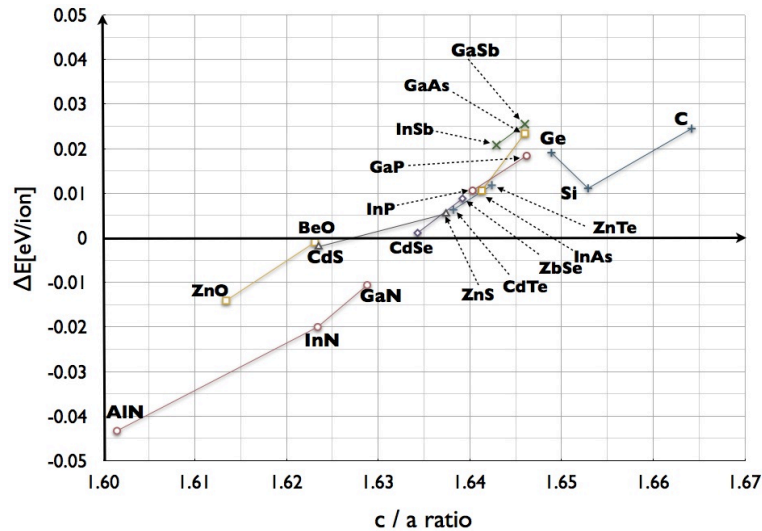


図 4: 構造エネルギー差 (ΔE_{ZB-W}) と，W の c/a 比 との相関．