



Si をドーピングした GaAs の XAFS 測定

岡島 敏浩

あいちシンクロトロン光センター

キーワード：SR、XAFS、Si doped GaAs、Local Structure

1. 背景と研究目的

半導体材料におけるドーパントの占有サイトや局所構造は、電氣的・光学的特性に大きく影響を与えるため、その詳細な解析が不可欠である。特に、元素ごとに局所構造を選択的に解析できる X 線吸収微細構造 (XAFS) 測定は、原子レベルでの構造理解に非常に有効な手法である。本研究では、高濃度 Si ドープ GaAs における Si の占有サイトおよび局所配位構造を明らかにするため、シンクロトロン光を用いた O K 端並びに Si K 端 XAFS 測定を行った。XAFS スペクトルの解析から、Si 原子が置換するサイトの違いや、隣接する原子との結合状態、空孔の存在などを捉えることができる。さらに、電子顕微鏡観察や第一原理計算と組み合わせることで、Si 関連欠陥構造の全体像を明確にすることを目的とした。

2. 実験内容

本研究では、Si 濃度が $2\sim4\times10^{19}$ atoms/cm³ の高濃度 Si ドープ GaAs 試料を用いて、Si の局所構造を解析した。試料はアニール処理後に機械的および化学的に研磨され、酸化膜の影響を除去した上で測定に供された。XAFS 測定は、あいちシンクロトロン光センターのビームライン BL6N1 および BL7U にて実施され、Si K 端のスペクトルを部分蛍光収量 (PFY) 法で、また、O K 端のスペクトルを全電主収量 (TEY) 法で取得した。得られたスペクトルは第一原理計算と比較し、Si の占有サイトや周囲の原子との相互作用、空孔の影響などを評価した。

3. 結果および考察

O K 端の測定から、試料表面に強固に吸着した O が除去されていることをまず確認した。図は、その後に測定した Si ドープ GaAs における Si K 端 XAFS スペクトルの実験結果(a)と、さまざまな 2 つの Si 原子の配置モデルに基づくシミュレーション結果 ((b)~(e)) を比較したものである。実験スペクトルでは、主にピーク 3 および 4 が顕著に観測され、加えてプリピーク (ピーク 1) やショルダーピーク (ピーク 2) も確認された。これらの特徴は、Si 原子が単一で存在するのではなく、周囲の原子や欠陥との相互作用を示唆している。特に、(c)に示す中性の Si_{Ga}-Si_{As} ダンベル構造によるシミュレーションスペクトルは、実験結果と良く一致しており、この構造が試料中に存在している可能性が高いことを示している。さらに、(e)に示すように、Si_{Ga}-Si_{As} ダンベルに As 空孔 (V_{As}) が隣接した構造は、実験スペクトル中のショルダーピーク (ピーク 2) の再現に優れており、空孔の存在がスペクトルに影響を与えていると考えられる。これらの結果から、Si は Ga および As サイトへの置換に加え、ダンベル構造や空孔との複合欠陥として存在することが示唆される。

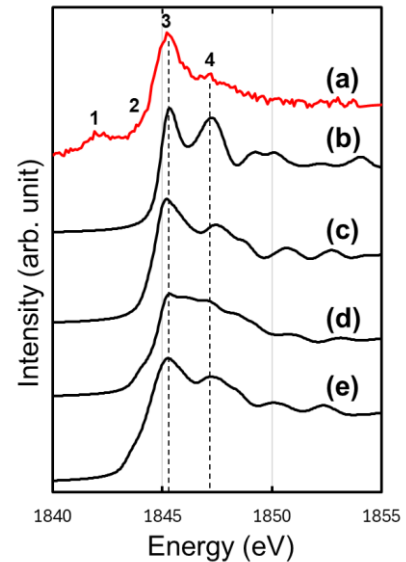


図 測定で得られた研磨した Si ドープ GaAs 試料の Si K 端 XAFS スペクトル(a)と 2 つの Si 原子の配置を変えて計算した理論スペクトル ((b)~(e)) の比較
(b) 離れた位置に Si 原子を配置
(c) 2 つの Si 原子でダンベル構造を形成
(d) Ga 空孔に隣接してダンベル構造を配置
(e) As 空孔に隣接してダンベル構造を配置