

完全無欠陥III-V/Siへテロ成長技術の創生に向けた  
GaP系半導体材料の成長様式の解明と太陽電池応用  
Growth Mechanism of GaP-Based Materials  
for Defect-Free III-V/Si Heteroepitaxy and Device Application

H30助自110

代表研究者 山根啓輔 豊橋技術科学大学 電気・電子情報工学系 助教  
Keisuke Yamane Assistant Professor, Electrical and Electronic-Information engineering,  
Toyohashi University of Technology

Diffusion length of adatom on the grown surface is one of the decisive factors to understand the growth mechanism. In this work the diffusion length of Ga was estimated by using a one-dimensional diffusion growth model and their temperature dependence was discussed on two principal axes. It is quantitatively clarified that the diffusion length of the Ga adatoms increased with growth temperature. Directional anisotropy in the diffusion length was observed along the  $\langle 110 \rangle$  and  $\langle 1\bar{1}0 \rangle$  directions. This anisotropy was highly consistent with a surface morphology i.e. elongation of the growth island along  $\langle 1\bar{1}0 \rangle$  is also consistent with the larger  $\lambda_{\text{Ga-}\langle 1\bar{1}0 \rangle}$  than  $\lambda_{\text{Ga-}\langle 110 \rangle}$ .

We can conclude that the GaP (001) exhibits a similar diffusion mechanism as the GaAs (001) for some growth conditions. The  $\lambda_{\text{Ga}}$  in GaP is related to the morphology of the islands and the orientation of this islands it is determined by the longer value of the  $\lambda_{\text{Ga}}$ . For growth temperature of 550°C and 600°C it seems that the diffusion mechanism is affected by the interaction of the Ga adatom and the dimers of the (2×4) surface reconstruction. At lower temperatures the diffusion mechanism changes since surface reconstruction changes, for the growth temperature of 650°C we observed a change in the surface reconstruction although the relation between  $\lambda_{\text{Ga-}\langle 1\bar{1}0 \rangle} > \lambda_{\text{Ga-}\langle 110 \rangle}$  was preserved, further study is required at this point.

### 研究目的

効率40%以上の民生用太陽電池セルの実現には、原理上、化合物半導体が必須である。しかし、既に実現されている高効率セルは、民生用Siセルの約100倍のコストがかかると試算されている。これは、土台となる異種材料基板(GaAs, Ge)がコストの大部分を占めるためであり、安価なSi基板への転換が期待されている。

これらの基礎となるSi基板上高品質化合物半導体を実現するために、大きく分けて(1) Si

基板上へのヘテロエピタキシャル成長、(2) Si基板への化合物半導体の直接接合が試みられている。前者の場合には、Si基板に貼り付ける層は、化合物半導体基板上に成長しなくてはならないため、大面積Si基板の特徴を最大限に生かすことができない。後者の場合には、価電子数、格子定数差などの問題を解決する必要がある。我々はこの問題の大部分を克服し、世界最高品質の $10^5 \text{ cm}^{-2}$ 台の欠陥密度をわずか20 nmの極薄膜GaP層で実証した。しかし、成長層の欠陥密度は下地となるSiの結晶品質と

比べれば未だ5桁以上の開きがあり、改善の余地は大きい。

これらの欠陥のほとんどが成長界面での異常成長に起因するものである。したがって、その成長様式を完全に理解することができれば、人類がもつ唯一無二の完全結晶であるSiに、結晶品質を損なうことなく化合物半導体を融合することが可能となる。本研究では、無欠陥ヘテロ成長技術の開発をめざし、GaP系化合物半導体の成長様式を原子スケールで解明することを目的とする。

## 概 要

高い変換効率が得られると期待されているIII-V族多接合型太陽電池や量子ドット型太陽電池は、基板コストが高い、Si単結晶太陽電池に比べて脆いなどの問題がある。もしSi基板上に実現できれば、基板コストが安く、機械的に堅牢な高変換効率太陽電池の作製が可能になる。これらのような太陽電池を実現するためには、GaPを母材とするSi格子整合系III-V-N混晶の結晶成長に関する理解が不可欠である。GaP系材料は、基板や組成比の違いによって求められる成長温度帯域が広いことが特徴として挙げられる。また、GaP/Si基板構造においては、積層欠陥やアンチフェーズドメイン(APD)などの価電子数の相違によって生じる欠陥が発生するなどの課題を抱えている。これらの問題解決には、広い温度範囲におけるGaP系材料の結晶成長メカニズムの詳細な理解が必要である。分子線エピタキシー(MBE)における吸着子の表面拡散長および拡散異方性は、結晶成長の成長様式や拡散過程を理解する上で重要なパラメータである。しかし、GaP成長におけるGa吸着子の表面拡散長について定量化された結果は、現在までに報告されていない。そこで本研究では、MBE法を用いたGaP成長に

おけるGa吸着子の表面拡散長および拡散異方性を定量的に評価することによって、表面拡散現象および結晶成長メカニズムに関する新たな知見を得ることを目的とした。

吸着子の表面拡散長および拡散異方性の評価実験を可能にするため、ストライプ構造を表面に有したGaP加工基板上に、平坦性の良いGaP成長層の形成を実現する方法を検討した。実験内容は、加工基板の作製工程におけるレジスト剥離と結晶成長前洗浄の処理条件の検討である。実験の結果、TMAH (Tetramethylammonium hydroxide) 系剥離液(5 min) およびHCl (5 sec, dip) の条件で洗浄することによって、加工基板の(001)テラス面上(レジスト剥離面)に平坦性が良く、且つピットの影響をほとんど受けずに拡散長の評価ができる十分な結晶性を有するGaP成長層の形成を可能にした。また、試料断面の観察結果から、前述した条件を用いることにより、加工基板表面のストライプ端の形状を保った状態で洗浄することが可能であることも確認した。

検討した条件を用いてGaP成長におけるGa吸着子の表面拡散長の評価を行い、成長層表面と表面拡散の関係性について考察した。GaP成長層の膜厚分布に拡散理論に基づく指数関数フィッティングを行った結果、膜厚分布が異なる指数面間のGa拡散モデルでよく説明できることが確認できた。また、表面拡散長のアレニウスプロットの結果より、成長温度500℃において<110>方向の拡散長が<1-10>方向よりも長い拡散異方性が確認できた。一方、成長温度550, 600, 650℃の高温成長においては、<1-10>方向の拡散長が<110>方向よりも長いことから、成長温度によって拡散異方性が反転していることがわかった。さらに、GaP成長表面の原子間力顕微鏡観察結果を表面拡散長異方性の評価結果と比較検討した結果より、

表面モフォロジーがGa吸着子の表面拡散長や異方性を反映していると考察することができた。

以上の結果より、GaP成長におけるGa吸着子の表面拡散長を定量的に評価し $\langle 110 \rangle$ および $\langle 1-10 \rangle$ 方向における吸着子の表面拡散の成長温度依存性および異方性を明らかになった。このことから、GaP成長における表面拡散現象および結晶成長メカニズムに関する新たな知見を得ることができた。今後の展開として、本研究で得られた知見が、APDの早期自己消滅機構の解明に活かせると期待している。

－以下割愛－