

# 物性工学

問題. 次の文章中の (a) ~ (bb) に当てはまる, 言葉, 数式, 記号等を対応する解答欄に書け。

III-V 族化合物半導体の多くは, 図 1 の結晶構造をもつ。図 1 の結晶構造は (a) 構造と呼ばれ, この構造をとる半導体材料として (b) が挙げられる。この構造は, III 族元素が構成する面心立方格子と V 族元素が構成する面心立方格子との入れ子構造になっている。一方の面心立方格子は, 他方の面心立方格子に対して, 図 1 の立方体の対角線に沿って, 対角線の長さの (c) だけずらした位置に存在する。2つの面心立方格子に同じ元素を配置すると, ダイヤモンド構造となる。ダイヤモンド構造をとる代表的な半導体材料として, (d) がある。ダイヤモンド構造において, 各原子はそれを取り囲む (e) の頂点に位置する (f) 個の最隣接原子と共有結合を持つ。最隣接原子間の距離は, (g)  $\times a$  である。また, 各原子は (h) 個の第 2 隣接原子を持ち, 第 2 隣接原子間の距離は, (i)  $\times a$  である。図 1 の立方体の単位格子は (j) 個の原子を含んでいる。ダイヤモンド構造の基本単位格子には (k) 個の原子が含まれる。

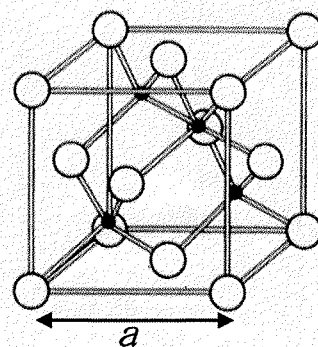


図 1 (a) 構造

次に, X 線回折による結晶の構造解析について考える。3 次元結晶格子の基本ベクトルを  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  とすると, 逆格子の基本ベクトルは,  $\mathbf{g}_1 = (\mathbf{l}), \mathbf{g}_2 = (\mathbf{m}), \mathbf{g}_3 = (\mathbf{n})$  となり, 逆格子ベクトルは,  $\mathbf{G}_{hkl} = h\mathbf{g}_1 + k\mathbf{g}_2 + l\mathbf{g}_3$  と定義される。整数  $h, k, l$  の組は  $(h k l)$  面の (o) と呼ばれ,  $\mathbf{G}_{hkl}$  は  $(h k l)$  面と (p) に交わる。 $(h k l)$  面に波数ベクトル  $\mathbf{k}_0$  の X 線を入射し, 回折パターンを調べると,

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \mathbf{G}_{hkl} \quad (1)$$

を満たす  $\mathbf{k}$  の方向に回折が起きる。実際の X 線回折では, 回折条件が満たされていてもその方向に回折線が現れない場合がある。これは, 単位格子内の異なる原子から散乱される波の間の干渉の効果であり, その効果は構造因子

$$S_{hkl} = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \exp(-i\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}_{\alpha}) \quad (2)$$

で表される。ここで,  $\mathbf{r}_{\alpha}$  は単位格子内の各原子の位置を決めるベクトル,  $f_{\alpha}$  は原子散乱因子である。

$S_{hkl}$  が 0 であると回折線は現れない。 $\mathbf{r}_{\alpha}$  を格子の基本ベクトルを用いて,

$$\mathbf{r}_{\alpha} = u_{\alpha}\mathbf{a}_1 + v_{\alpha}\mathbf{a}_2 + w_{\alpha}\mathbf{a}_3 \quad (3)$$

と表し(2)に代入すると,

$$S_{hkl} = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \exp[-2\pi i(hu_{\alpha} + kv_{\alpha} + lw_{\alpha})] \quad (4)$$

となる。

面心立方格子の場合，基本単位格子の 4 個の原子は， $r_1 = (0,0,0)$ ， $r_2 = \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ ， $r_3 = \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right)$ ， $r_4 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$  の位置を占める。いずれの原子も同じ原子散乱因子  $f$  を持つとすると，構造因子  $S_{hkl_{FCC}}$  は，

$$S_{hkl_{FCC}} = f\{1 + \exp[-i\pi(h+k)] + \exp[-i\pi(k+l)] + \exp[-i\pi(l+h)]\} \quad (5)$$

となる。 $S_{hkl_{FCC}}$  の値は， $h, k, l$  がすべて偶数もしくは奇数の場合は  $(q)$  に，偶数と奇数の混合の場合は  $(r)$  になる。

次に，ダイヤモンド構造の構造因子  $S_{hkl_{Diamond}}$  を考える。基本単位格子の 8 個の原子は，

$$\begin{aligned} r_1 &= (0,0,0) \\ r_2 &= \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \quad r_3 = \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right), \quad r_4 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right) \\ r_5 &= (s) \\ r_6 &= (t), \quad r_7 = (u), \quad r_8 = (v) \end{aligned} \quad (6)$$

の位置を占め，いずれも同じ原子散乱因子  $f$  を持つ。尚， $r_5$  は  $r_1$  からの最隣接原子の位置に対応する。これらを (4) 式に代入すると，

$$\begin{aligned} S_{hkl_{Diamond}} &= f\{1 + \exp[-i\pi(h+k)] + \exp[-i\pi(k+l)] + \exp[-i\pi(l+h)]\} \times (w) \\ &= S_{hkl_{FCC}} (w) \end{aligned} \quad (7)$$

となる。 $S_{hkl_{FCC}}$  について導いた条件より，

$$S_{hkl_{Diamond}} = \begin{cases} (q) \times (w) & (h, k, l \text{ がすべて偶数もしくは奇数}) \\ (r) \times (w) & (h, k, l \text{ が偶数と奇数の混合}) \end{cases} \quad (8)$$

であり，

$$S_{hkl_{Diamond}} = \begin{cases} (x) & (h+k+l = 4n) \\ (y) & (h+k+l = 4n \pm 1) \\ (z) & (h+k+l = 4n \pm 2) \end{cases} \quad (9)$$

が得られる。但し， $n$  は任意の整数である。ダイヤモンド構造で観測される X 線回折のピークを回折角度が小さい順に並べると， $(aa)$ ， $(bb)$ ， $(3\ 1\ 1)$  面となる。