

Si, Ge 単結晶におけるボイド欠陥形成に関する分子動力学計算

Molecular dynamics calculation on formation of void defects

in Si and Ge crystals

岡山県立大学大学院情報系工学研究科

○大田周作, 末岡浩治

Okayama Pref. Univ., Dept. of System Engineering

○S. Ota, K. Sueoka

E-mail: shusaku1122@gmail.com

【緒言】 LSI の基板として用いられる CZ-Si 単結晶において, 結晶成長中に取り込まれる原子空孔 V が集積して約 $0.1 \mu\text{m}$ サイズのボイド欠陥が形成される. また最近, 同様の現象が Ge 単結晶についても報告されている[1]. しかし, ボイド欠陥形成の初期過程については, 実験による観測が困難なため, よくわかっていない. そこで本研究では, Si と Ge 単結晶におけるボイド欠陥形成の初期過程について, 分子動力学法に基づいて解析した.

【計算方法】 Si あるいは Ge 原子 1000 個からなる立方体の計算セルを用意した. この計算セル中の原子を取り去ることで, 原子空孔 V を導入した. 計算では, まず, 5 個以下の V を含有するボイドを構造別に分類し, その内部エネルギーを求めた. なお, V が 3 個までのボイドは 1 種類, 4 個では 3 種類, 5 個では 7 種類である. ここで, ボイド欠陥中のいずれの V も 2 個以下の別の V と結合しているモデルをライン型ボイドとよび, それ以外を別れ道型ボイドと呼ぶことにする. 計算には分子動力学ソフト Materials Explorer を使用した. ポテンシャル関数は Tersoff, アンサンブルは NTP, 解析温度は 298K であり, 内部エネルギー値からボイドの形成エネルギーなどを求めた.

【結果】 Si 結晶中で 4 個の V を含むボイド欠陥の内部エネルギーを図 1 に示す. これより, モデル 2 のライン型ボイドが最安定であるが, この 3 個のモデルのエネルギー差は小さく, ボイドの成長過程においてどの構造も取り得る可能性が高い. さらに, Si 結晶中で 5 個の V を含むボイド欠陥の内部エネルギーを図 2 に示す. これより, ライン型ボイドのモデル 4 が最安定であるが, 別れ道型ボイドのモデル 1 とのエネルギー差は 0.01eV とわずかである. なお, 6 個以上の V を含むボイドについての解析や, 温度を考慮した計算結果については, 当日発表する予定である.

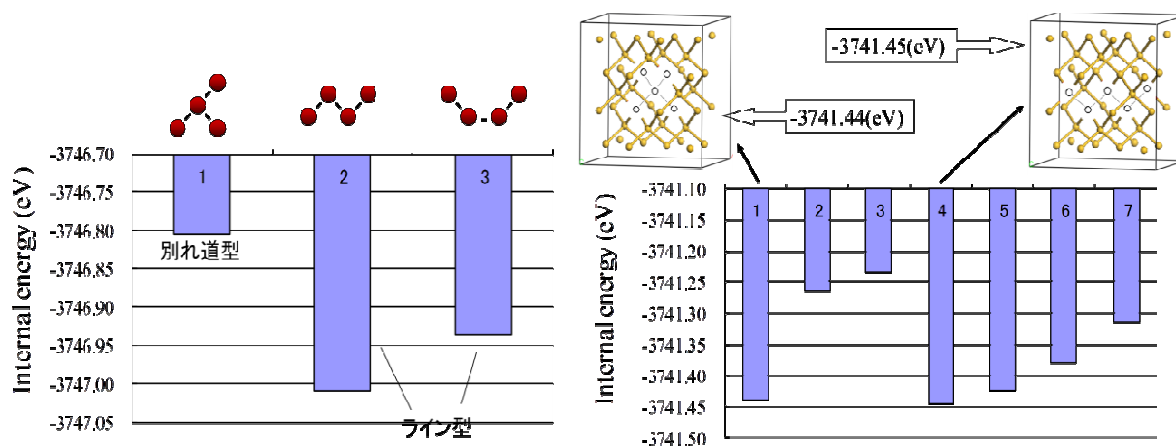


Fig.1 Internal energies of voids including 4 vacancies in Si. Fig.2 Internal energies of voids including 5 vacancies in Si.

[1] J. Vanhellemont, P. Spiewak, K. Sueoka and I. Romandic, *Phys. Status Solidi C* **6**, 1906–1911 (2009)