

3、4 及び 5 族原子をドーブした Si 結晶中の空孔形成エネルギー

Vacancy formation energies in Si crystals doped with atoms of groups 3, 4 and 5

東北大金研 (研究場所) °末澤正志、井上海平、飯島嘉明、深田直樹、米永一郎

I.M.R., Tohoku Univ. °Masashi Suezawa, Kaihei Inoue, Yosiaki Iijima, Naoki Fukata,

Ichiro Yonenaga

E-mail: suezawa@imr.tohoku.ac.jp

はじめに：我々は、シリコン結晶中の空孔形成エネルギーを、水素ガス中加熱・急冷法を用いて測定している。この方法を用いて、高純度シリコン結晶中の空孔形成エネルギーを、3.85eV と決定した。その後、各種不純物原子をドーブした結晶中では、形成エネルギーが上記の値に比して小さくなることを報告した。今回は、3, 4 及び 5 族原子をドーブした試料を用いて、系統的な研究を行った結果を示す。

実験：試料は、3 族 (B, Al, Ga, In), 4 族 (C, Ge, Sn) 及び 5 族 (P, As, Sb, Bi) 原子をドーブした結晶から切り出した後、機械研磨及び化学研磨をして作成した。但し、下線を引いた原子をドーブした結晶は CZ 法で育成した。試料を水素ガスとともに透明石英管中に封入したのち、急冷温度で加熱後、水中へ急冷した。急冷中に形成された空孔と水素の複合体を VH_4 (1 個の空孔と 4 個の水素原子の複合体) に成長させるため、450°C で 1 時間焼鈍した。その後、 VH_4 による光吸収を測定し (ピーク位置は約 2223cm^{-1} , 測定温度は約 7 K、分解能は 0.25cm^{-1}) ,その吸収強度を空孔濃度の目安とした。

結果：いずれの原子をドーブした試料でも、空孔形成エネルギーは高純度結晶のものより小さかった。これは、空孔とドーブした原子の間に結合エネルギーが存在することを示す。すなわち、結合エネルギーを、高純度結晶中の空孔形成エネルギーと不純物ドーブ結晶中のものとの差と定義する。結合エネルギーと不純物原子の共有結合半径の関係をプロットすると、Si の共有結合半径付近が最大となるふるまいを示した。

空孔と不純物の結合エネルギーが関係すると思われる、従来の研究結果との比較検討を行う。それらの結果とは、1) 第 3 隣接対以内の対を保ったままの拡散 (ドーパントの対拡散モデルも含む)、2) 理論計算 (第一原理計算及び弾性論)、3) 二次欠陥形成への不純物の影響、等である。