

## シリコン結晶中ヒ素欠陥の第一原理 X 線光電子分光計算

## First-principles X-ray photoelectron spectroscopy calculation

## on the arsenic defects in silicon crystal

慶大理工 ○山内 淳、岸 大季、宮澤美希

Keio University Faculty of Science &amp; Technology, ○Jun Yamauchi, Hiroki Kishi, Miki Miyazawa

E-mail: jy AT rk.phys.keio.ac.jp (replace 'AT' by '@')

Si 結晶中のドーパント原子の挙動を知ることは素子の微細化が進むにつれて益々重要になってきている。近年では実験的に高強度放射光施設を用いて欠陥濃度の低さを補い精度の高い X 線光電子分光 (XPS) データが得られており、ドーパント原子欠陥の表面深さ方向の分布も得られている [1]、一方で理論的にも第一原理計算により B 原子について非常に高い精度で実験を再現する報告がなされている [2]。本発表では同様の計算手法による Si 中の As 欠陥について報告する [3]。

XPS 計算は理想結晶で 512 Si 原子に相当するスーパーセルを用いて原子配置をエネルギーに関して最適化した後、As3d 軌道を価電子とする擬ポテンシャルを用いた  $\Delta$ SCF 法で行った。置換配置の中性並びに荷電状態置換配置ヒ素から測った XPS の束縛エネルギーを図 1 に示す。As に関しては筒井等により -1.2eV 付近に特徴的なピークが生じることが報告されている [4]。中性の範囲内では該当する欠陥が見つからなかったが、荷電状態を含めると空孔と置換配置ヒ素からなる欠陥が候補となることが判明した。形成エネルギー計算からもこれらの欠陥は、他の欠陥に比べてエネルギー的に安定であるとの結果が得られている。

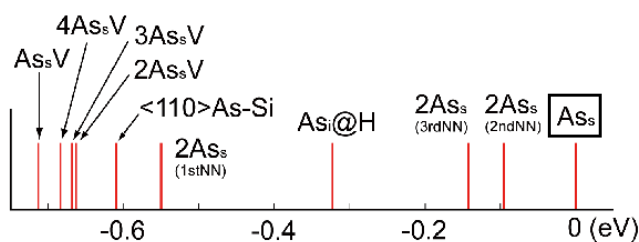
[1] K. Tsutsui, *et al.*, J. Appl. Phys **104** 093709 (2008).[2] J. Yamauchi, Y. Yoshimoto, and Y. Suwa., Appl. Phys. Lett. **99** 191901 (2011).

[3] H. Kishi, M. Miyazawa, N. Matsushima, and J.

## Neutral

Yamauchi, AIP Conf. Proc. **1583** 226 (2014)[4] K. Tsutsui, *et al.*, IEEE Proc. Int. Workshop on Junction Technology (IWJT) **4** (2012).

**Fig. 1** Calculated XPS binding energies for the As 3d level in the As defects in Si. Neutral states (upper panel) and charged states (lower panel) are shown. Symbols As<sub>s</sub>, As<sub>i</sub>, and V stand for substitutional As, interstitial As, and vacancy, respectively. Defects are indicated by the combinations of the symbols. For example, the 4As<sub>s</sub>V means the defect which consists of a vacancy and the surrounding four As<sub>s</sub>. The energy origins are those of the neutral and charged As<sub>s</sub> for the neutral and charged states, respectively.



## Charged

