20a-A20-6

Si結晶中のVH_4欠陥形成に与えるCドープの効果（第一原理計算）

Ab initio analysis on effect of carbon doping on VH_4 formation in single crystal Si

岡山県立大 情報工 ○末岡浩治，中村浩三，神山栄治

Okayama Pref. Univ., Dep. Communication Eng., K. Sueoka, K. Nakamura and E. Kamiyama

E-mail: sueoka@c.oka-pu.ac.jp

深田らは，Si単結晶に約1.7×10^{17} atoms/cm^{3}の濃度でCをドープすると，水素加熱急冷により観察される空孔・水素複合体欠陥（VH_4）の濃度が3倍に増加することを報告している[1]．この現象を説明するモデルとして，高温加熱中に置換炭素（C_s）が格子間炭素（C_i）になることでVを生成する反応が考えられる．しかし，表1に示すようにこの反応におけるエネルギー利得は-5.58 eVと負であるため[2]，このモデルを採用することは難しい．

そこで，C_s濃度がV濃度より数桁高いことから，高温あるいは冷却中にC_sH_nが多量に形成され，450℃熱処理においてその一部が最安定のVH_4に構造変化するモデルを考えた．本研究では，第一原理計算により，この反応が起こる可能性を検討した．計算にはソフトウェアCASTEPを用い，C_s，C_sH_n (n = 1～4)，C_i，V，VH_n (n = 1～4)をそれぞれ含む216原子の計算セルについて全エネルギーを求めた．さらにその結果から，C_sH_n複合体を経由してVH_4が形成する過程について考察した．

図1に $V + nH \rightarrow VH_n$ および $C_s + nH \rightarrow C_sH_n$ 反応におけるエネルギー利得の計算結果を示す．これより，VにHが1個結合すると約2 eVの利得があることがわかる．また，この利得はVの4個の未結合手がHで終端されるVH_4までほぼ同じ大きさである．一方，エネルギー利得はVよりも小さいものの，C_sもHと結合して安定なC_sHやC_sH_2複合体を形成する．C_sH_2以上の反応も起こりうるが，エネルギー利得は小さい．

表1に$C_sH_n + mH \rightarrow VH_{(n+m)} + C_i$の反応におけるエネルギー利得を示す．これより，$C_sH_3$までの複合体では，この反応は起こらないことがわかる．しかし，C_sH_2が2個のHと結合してC_sH_4が形成すれば，$C_sH_2 + 2H \rightarrow VH_4 + C_i$の反応は1.35 eVの利得があるため，$VH_4$は生成しうる．当日は$C_sH_4$から$VH_4 + C_i$が形成する過程における反応障壁についても報告する．

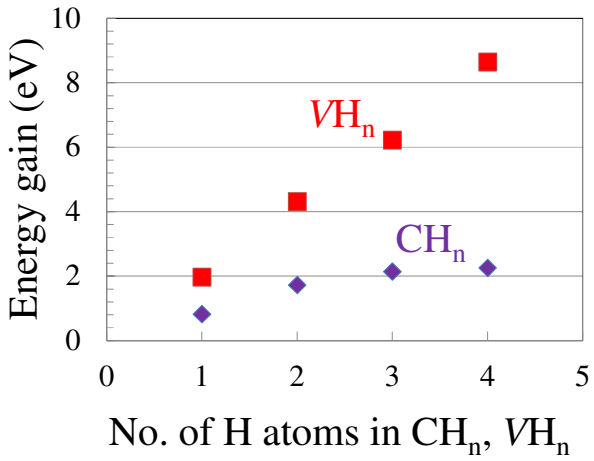

図1　$V + nH \rightarrow VH_n$，$C_s + nH \rightarrow C_sH_n$ における
エネルギー利得の計算結果

表1　$C_sH_n + mH \rightarrow VH_{(n+m)} + C_i$ 反応のエネルギー利得

反応式	エネルギー利得 (eV)
$C_s \rightarrow V + C_i$	-5.58
$C_sH \rightarrow VH + C_i$	-4.43
$C_sH + H \rightarrow VH_2 + C_i$	-2.09
$C_sH_2 + H \rightarrow VH_3 + C_i$	-1.08
$C_sH_2 + 2H \rightarrow VH_4 + C_i$	1.35

参考文献

1. N. Fukata, M. Suezawa and A. Kasuya, *Jpn. J. Appl. Phys*. 41, L1034 (2002).
2. K. Sueoka, E. Kamiyama and J. Vanhellemont, *J. Appl. Phys*. 114, 153510 (2013).

© 2014 年　応用物理学会