

Si中の複空孔形成における空孔拡散の原子描像

An atomistic picture of the diffusion of two vacancies forming a di-vacancy in Si

岡山県立大学 情報工学部 ○神山栄治, 末岡浩治

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

E-mail: ejkamiyama@aol.com

【研究背景】半導体Si中では点欠陥の凝集により様々なクラスタが形成し、その一部はデバイス性能に影響することが知られている。高集積化がさらに進めば、より微細なクラスタもデバイスに影響するであろう。空孔系のクラスタを例に挙げると、1990年代に100 nm程度のボイド欠陥[1]が発見され、その後、2000年前後に空孔起因で形成した20 nm程度の酸素析出物[2]が注目された。

一方、クラスタ形成に関する原子レベルの理論的取扱いは、古典論をベースとしたものが大部分である。従って、量子論的な効果を取り入れることで、修正する余地があると考えられる。このような背景から、我々のグループでは、近年発展した密度汎関数法をクラスタ形成に適用することでこの量子論的効果を明らかにし、微細なクラスタ形成の本質に迫ることを研究の最終目的としている。本報告では、その入り口としてSi結晶中の複空孔形成を考える。

【着目点】原子の世界を可視化する量子論的ツールとして、第一原理分子動力学 (MD) 計算法がある。近年の計算機の発達によりその普及が進んではいるが、この計算結果から物理的本質を抽出するのは難しい。本報告では第一原理MDの代替手法を提案し、その適用例としてSi原子64個からなるスーパーセルに2個のVを導入した系を考える。

【手法】このスーパーセルに2個のVを導入した系にGavartinら[3]の手法を適用すると、図1に示すように、等価でない2個のVの配置の組み合わせが9個となる。そこで、各々のモデルにおいて中心のVを格子位置0に置いて固定し、このVに向かって他方のVが拡散する際の遷移状態を調べた。

【結果】図2に2個のVの結合エネルギーの距離依存性[4]を示す。図中の番号は、図1に示す他方のVの配置を表し、曲線上の△は遷移状態におけるエネルギーを表している。これより、Vに向かって拡散する他方のVは、結合状態間を熱的に遷移することが示された。当日の講演では、図2のダイアグラムからさらに読み取れることを議論する。

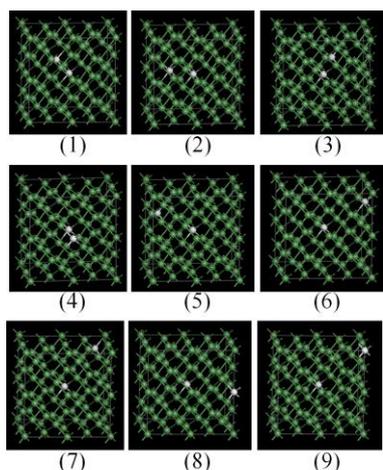


図1 64Siセル中2空孔(白)の全配置.

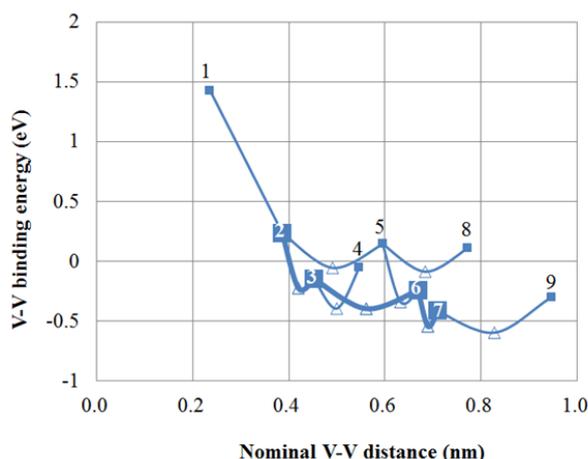


図2 2空孔の結合エネルギーダイアグラム.

【参考文献】

1. J. Ryuta, et. al., Japanese Journal of Applied Physics 29 (1990) L1947.
2. K. Nakashima, et. al., Journal of The Electrochemical Society 147 (2000) 4294.
3. J. L. Gavartin, et. al., ECS Trans., 25, 1335 (2009).
4. Accepted to Physica Status Solidi.