

第一原理計算による半導体結晶中の真性点欠陥に関する研究

Density Functional Theory Study on Intrinsic Point Defects in Semiconductor Crystals

岡山県立大学情報工学部, 末岡 浩治

Okayama Prefectural University, Koji Sueoka

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

最近 10 年間に於いて半導体結晶中の真性点欠陥, すなわち原子空孔 (V) と自己格子間原子 (I) の物性や挙動の理解が大幅に進んでいる. この進歩は, 第一原理計算法の成熟や計算機パワーの大幅な上昇に負うところが大きい.

本発表では, Si と Ge 結晶中の点欠陥研究において最も成功した第一原理計算の 1 つである密度汎関数法に注目し, (1) 3 次元周期境界条件を課したスーパーセル法, (2) 平面波基底, (3) ウルトラソフト擬ポテンシャル法, を適用した計算の制約条件や注意点などを述べたうえで, 実験と比較した計算のメリットについても述べる. 図 1 に Si や Ge 結晶中の真性点欠陥の計算モデルを示す. とくに自己格子間原子 (I) にはいくつかの配置があり, それをすべて考慮する必要がある. これらの欠陥について, 形成エネルギー, 形成エントロピー, 拡散障壁, 帯電状態や不純物との結合エネルギーなどを得ることができる[1].

さらに, 大口径 Si や Ge 結晶の高品位化へ寄与した実例として, 例えば図 2 に示すような結晶成長中の熱応力が無欠陥 Si 結晶の成長条件に与える影響を予測した研究[2]を紹介することで, 第一原理計算の有用性を共有する.

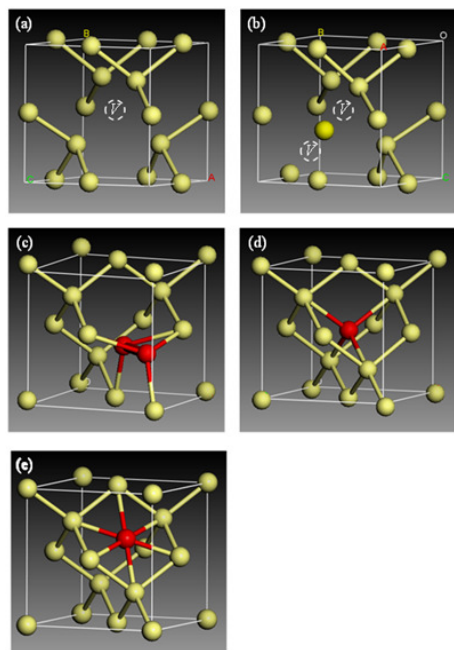


Fig. 1 Geometries of a (a) single vacancy, (b) split vacancy, (c) self-interstitial at D-site, (d) self-interstitial at T-site, and (e) self-interstitial at H-site, in a conventional Si cubic unit cell.

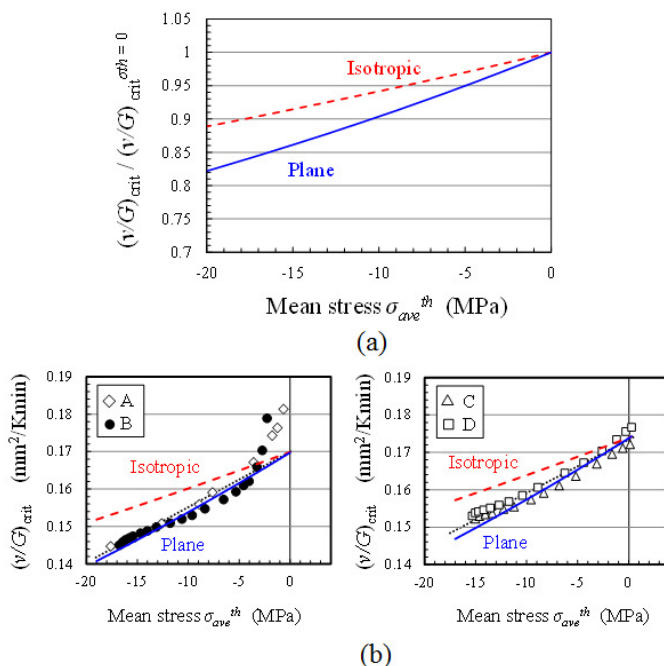


Fig. 2 (a) Calculated $(v/G)_{crit}$ values as function of compressive mean thermal stress. (b) Calculated (blue full and red dashed lines) and experimental $(v/G)_{crit}$ data (symbols) as a function of compressive mean thermal stress.

参考文献

1. K. Sueoka, E. Kamiyama, P. Spiewak and J. Vanhellemont, *ECS JSSST*, **5** (2016) P3176.
2. K. Sueoka, E. Kamiyama, J. Vanhellemont and K. Nakamura, *ECS SSL*, **3** (2014) P69.