

Si 中 Cu_4 複合体と水素の不純物反応Defect reactions of hydrogen impurity with Cu_4 complex in silicon

阪大産研, 白井光雲, 藤村卓巧

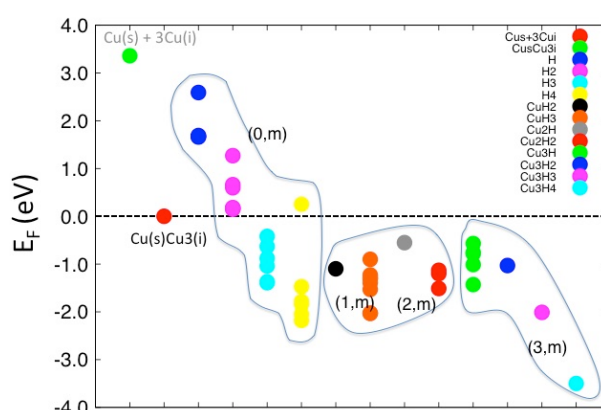
ISIR, Osaka Univ., ^oKoun Shirai and Takayoshi Fujimura

E-mail: koun@sanken.osaka-u.ac.jp

シリコン結晶中で、銅不純物を適当な条件でアニールすることで銅複合体欠陥が形成される。この複合体はフォトルミネッセンスにおいて1014 meVに鋭いゼロフォノン線を示しCu-PLと呼ばれている。この欠陥は長時間にわたって発光強度の減衰が小さく安定性が高いため発光素子としての応用が考えられている。この銅複合体は長い間、銅2個からなると考えられてきたが、最近このゼロフォノン線の同位体効果により、複合欠原子4個からなる複合欠陥であることが示された[1]。その構造は、置換位置に1つ格子間位置に3つ銅原子が入った $\text{Cu}_{\text{(s)}}\text{Cu}_{3\text{(i)}}$ であることが理論から示された[2]。ところが、この複合体欠陥は非常に安定であるにも関わらず、水素を導入することでかい離することが、最近実験で示されている [3]。水素は $\text{Cu}_{\text{(s)}}$ の周りの3つの $\text{Cu}_{\text{(i)}}$ を順に置き換え、最終的には $\text{Cu}_{\text{(s)}}\text{H}_3$ となるとYarykinらは考えているが、反応過程の詳細は明らかではない。

本研究では、安定な銅複合体 $\text{Cu}_{\text{(s)}}\text{Cu}_{3\text{(i)}}$ が水素とどのように反応し、最終生成物が何になるかを第一原理計算により研究する。反応中間生成物としてさまざまなものが考えられるが、置換位置の銅 $\text{Cu}_{\text{(s)}}$ は動かないとして、その周りの格子間位置の銅と水素の複合体 $\text{Cu}_{\text{(s)}}\text{Cu}_{\text{n(i)}}\text{H}_{\text{m}}$ を考え、それらの間のエネルギーを計算することで反応過程を推測する。図1にはさまざまな複合体 $\text{Cu}_{\text{(s)}}\text{Cu}_{\text{n(i)}}\text{H}_{\text{m}}$ のエネルギーを示す。簡便的に $\text{Cu}_{\text{(s)}}\text{Cu}_{\text{n(i)}}\text{H}_{\text{m}}$ 複合体を(n,m)と略す。中間生成物として格子間位置の銅がない複合体(0,m)を実験家は推定しているが、計算ではそれらは相対的に安定ではない。安定な銅複合体 $\text{Cu}_{\text{(s)}}\text{Cu}_{3\text{(i)}}$ における

3つの銅原子がそのまま水素と置き換わるとは考えにくい。反対に、3つの銅原子はそのまま、その上に水素が加わる(3,m)構造の方が安定であることが示された。この結果から反応過程を考察する。



[1] M. Steger, et al., Phys. Rev. Lett. **100** 177402 (2008).

[2] K. Shirai, et al., J. Phys. Condens. Matter, **21**, 064249 (2009).

[3] N. Yarykin and J. Weber, Appl. Phys. Lett. **105**, 012109 (2014).