

Si 単結晶中のフレンケルペア形成過程に関する第一原理解析

First principles analysis on Frenkel pair formation in Si crystals

岡山県立大学大学院情報系工学研究科 ○福田大晃, 末岡浩治

Okayama Prefectural University, ○Hiroaki Fukuda, Koji Sueoka

E-mail: luckysnoop777y@yahoo.co.jp

Si 結晶中の真性点欠陥の形成機構として, (1)格子間 Si (I) と原子空孔 (V) が対形成するフレンケル型と(2) I または V が単独で形成するショットキー型の 2 種類が考えられている. フレンケルペアは 1 つの格子点から Si 原子が放出されて同時に V と I が形成するが, その形成エネルギーの考え方や, 単独の V と I に至る経路など, 現在でも議論が続いている[1]. そこで本研究では, 第一原理計算を用い, フレンケルペアの形成過程に注目した解析を行った.

慣用単位格子を $2 \times 2 \times 2$ 倍した, Si 原子 64 個からなる立方体の計算モデルを用意した. フレンケルペアとして V と I の可能なすべての配置 (1 個の V に対して D-site の I が 36 通り, T-site の I が 9 通り) を考慮し, 第一原理計算により構造最適化することで全エネルギーを求めた. フレンケルペア形成に必要なエネルギーは V と I の形成エネルギーの和であり, $E_f = E_{tot} [\text{Si}_{63}V_1I_1] - E_{tot} [\text{Si}_{64}]$ で求められる. ここで E_{tot} は [] 内のモデルについての全エネルギーである. さらに N 個の格子点に n 個の V を, N' 個の格子間位置に n 個の I をばらまくことを考え, $N, N' \gg n$ ならびに $N = N'$ と仮定すると, フレンケルペアの熱平衡濃度 C は式(1)で与えられる[2]. すなわち, フレンケルペアの場合は, V と I の形成エネルギーの平均値 ($= E_f / 2$) が濃度を支配するような形となる. この $E_f / 2$ をフレンケルペアの実質的な形成エネルギーと呼ぶことにする.

$$C = n/N = \exp(-E_f / 2kT) \quad (1)$$

フレンケルペアの実質的な形成エネルギーを図 1 に示す. 図において, 横軸は V と I 間の距離を示している. フレンケルペアとみなせる状態に移行するまでに, 図 1 中の①で実質的な形成エネルギーが約 1.55 eV の, FFCD (Fourfold Coordinated Defect) と呼ばれる Si 原子が格子位置から少しずれた構造と, ②で実質的な形成エネルギーが約 2.45 eV の, I が V の 2 つのダンダリングボンドを末端している V - I (Bridge)構造の 2 つが過渡状態として確認できた.

さらに, V と I の距離が約 3.8 Å 以上になると, I が [110]D-site (図 1 中の③) または T-site (図 1 中の④) に存在した完全なフレンケルペアとみなせる構造となり, その実質的な形成エネルギーは約 3.5 eV であった. また図中には, LST-QST 法で求めた④の I に至る経路における拡散障壁エネルギーも示している. これらの結果から, フレンケルペアの濃度を決定する実質的な形成エネルギーは単独の点欠陥の形成エネルギーと大差なく, その形成におけるエネルギー障壁も小さいことがわかった.

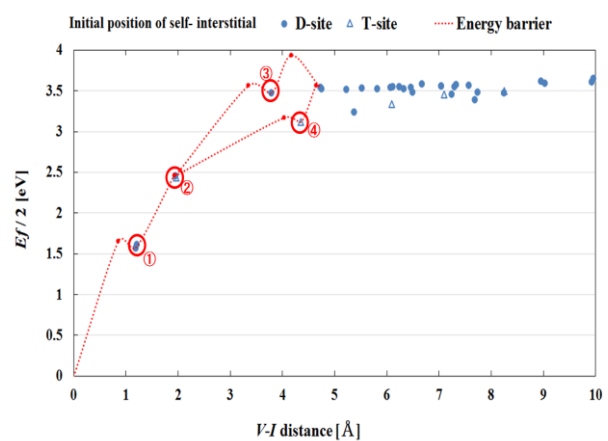


Fig. 1 $E_f / 2$ of Frenkel pair in perfect Si. Red lines show the diffusion barriers of I from V .

参考文献

1. M. Suezawa *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **56**, 048005 (2017).
2. 藤田英一, 結晶欠陥, 朝倉書店.