

第一原理ランダム構造探索法を用いたシリコン結晶照射誘起欠陥の構造データベース解析

Structure Database Analysis for Irradiation Induced Defect in Silicon Crystal using Ab Initio Random Structure Searching

淡江大理¹, Cambridge 大理², ○(D)稲垣 淳¹, Georg Schusteritsch², Chris J. Pickard², 李明憲¹

TamKang Univ.¹, Cambridge Univ.², Jun Inagaki¹, Georg Schusteritsch², Chris J. Pickard²,

Ming-Hsien Lee¹ E-mail: ctec.inagaki@gmail.com

結晶欠陥の評価方法として、第一原理ランダム構造探索法 (Ab Initio Random Structure Searching, AIRSS^[1]) を用いた、第一原理計算による構造データベース解析を提案する。

対象とする系にはシリコンバルク結晶の照射誘起欠陥を選んだ。電子照射による損傷を模擬するため、バルクモデル中央部に原子のランダム配置領域を設け、さらにデータの有意性を高めるための非配置領域を設定し、各系サンプル数約 100 の初期構造探索を実施した。初期探索の結果に対して統計解析を行い、集団分けののちにその集団を代表するモデルにさらに精度の高い最終計算を施した。結果から、例えば単原子空孔を代表的安定構造とする系では四配位欠陥複合体 (fourfold coordinated defects complex) などが予測され、本手法が半導体結晶欠陥の大域的構造データベース解析に資することが示唆された。

当日はプロトン照射の結果との比較についても発表する。

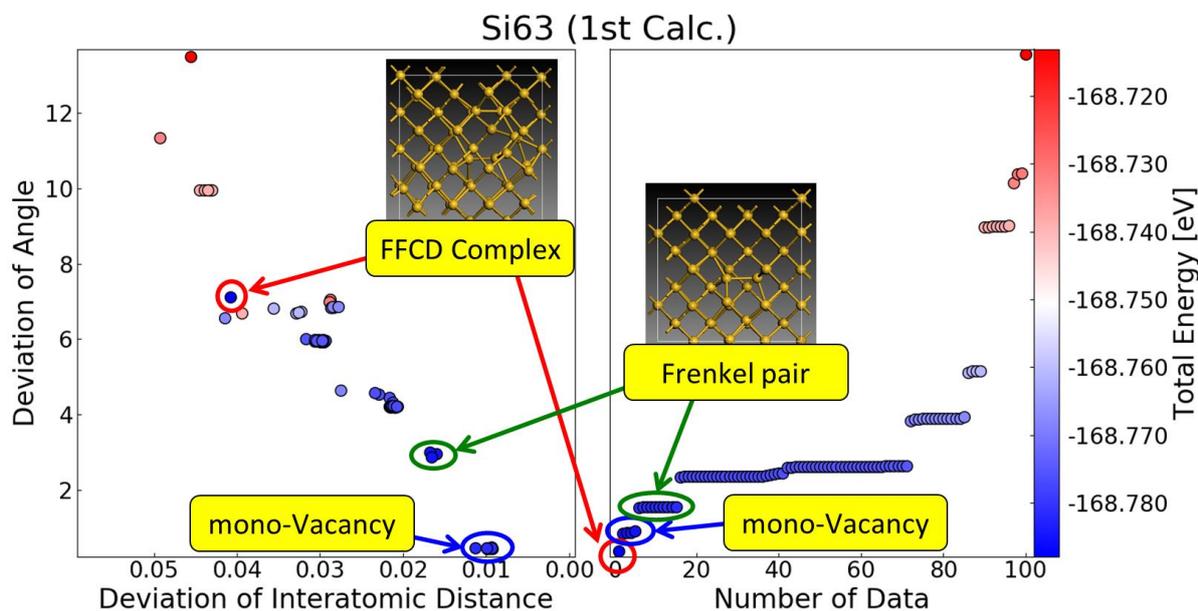


Fig. 1 Scatter plot of the initial calculations. The left one is deviation of angle on Y axis, interatomic distance on X axis. The right one is energy ranking for the system “Si63”. Color map of markers is common on both figures. After finalization, the energy rank of FFCD complex was changed.

[1] C. J. Pickard et al, *Phys. Rev. Let.* **97**, 045504 (2006)