

シリコン結晶中の熱平衡点欠陥濃度

Concentrations of thermal equilibrium point defects in silicon crystals

末澤正志¹、飯島嘉明¹、米永一郎¹ (1.東北大金研：研究場所)

I.M. R., Tohoku Univ. M. Suezawa, Y. Iijima, and I. Yonenaga

E-mail: suezawa.msashi@gmail.com

はじめに：シリコン結晶中の熱平衡点欠陥（空孔及び格子間原子）濃度は、結晶成長欠陥や自己拡散機構を解釈する際には不可欠であるが、いまだ求められていない。今回の発表では、昨年春発表した自己拡散機構の研究結果から、逆にそれらを近似的に求めた結果を報告する。

昨年春の報告：最近、拡散実験中の試料の汚染防止に特別の注意を払った結果、拡散係数の温度依存性が1種類であることが見いだされた (T. Südkamp & H. Bracht, Phys. Rev. B **94**, 125208(2016))。彼らが得た $\log D_{SD}$ 対 $1/T$ (D_{SD} ：自己拡散係数、 T ：測定温度)を、水素ガス中加熱・急冷実験から得られた点欠陥形成エネルギー等を用いて解析し、自己拡散係数の空孔成分と格子間原子成分を次のように得た。

$$D_V = 0.970 \exp(-4.3 \text{ eV} / kT) \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$$

$$D_I = 6.75 \times 10^2 \exp(-4.8 \text{ eV} / kT)$$

D_V 及び D_I はそれぞれ空孔及び格子間原子機構による自己拡散係数である。これらの前指数因子から、自己拡散のエントロピーを求めると、それぞれ 6.3k 及び 11.7k であった。

今回の内容：拡散係数は、点欠陥の濃度 (c) とジャンプ頻度 (J) の積で与えられる： $D = c \times J$ 。実験で得られた J から、そのエントロピーの大きさを求め、拡散のエントロピーからそれを差し引くことにより、濃度項のエントロピーを求めた。そして、下記の表式を得た。

$$c_V = 5 \times 10^{22} \exp(6) \exp(-3.85 \text{ eV} / kT) \text{ cm}^{-3}$$

$$c_I = 5 \times 10^{22} \exp(9.6) \exp(-4.3 \text{ eV} / kT)$$

融点での熱平衡濃度は、空孔では $6.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ 、格子間原子では $1.1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ であると求められた。これらの値の大小関係は、従来使われているのとは正反対である。