パワーデバイス用 Si 結晶中の欠陥形成に関する第一原理解析

First-principles analysis of defect formation in silicon crystals for power device application

岡山県立大学情報工学部[1]，千葉工業大学工学部[2]
○(M1)土屋 大輝[1]，末岡 浩治[1]，山本 秀和[2]
Okayama Prefectural University[1], Chiba Institute of Technology[2]
○Daiki Tsuchiya[1], Koji Sueoka[1], and Hidekazu Yamamoto[2]
E-mail: tsuchiya.opu@gmai.com

パワーデバイス用 Si 結晶では，スイッチング特性を改善するために一般的には，電子線照射により再結合中心を導入している．照射により Si 結晶中には点欠陥(格子間 Si 原子 *I*, 原子空孔 *V*)が発生するが，これらは Si 結晶中のドーパント(P)や置換炭素 (C_s)などの不純物と反応することで原子空孔対(*V*-*V*)や空孔リン対(*V*-P)，格子間炭素 (C_i) ，さらには炭素の複合体である格子間炭素-置換炭素対(C_i-C_s)や炭素と酸素との複合体である(C_i-O_i)などが生成される．キャリア・ライフタイム制御欠陥は *V*-*V* や *V*-P のような深い準位の欠陥と考えられており，C_i や C_i-C_s，C_i-O_i などがライフタイムの制御性に影響を与えると考えられている．

本研究では電子線照射により導入される *V* と *I*，ドーパント P，不純物 C と O を対象として，*V*-*V*，*V*-P，C_i，C_i-O_i，C_i-C_s などの形成過程や *V*，P と C_i，O_i，C_i-O_i ，C_i-C_s の相互作用による構造変化の過程に注目した第一原理計算を行った．Si 64 原子モデルにおける可能なすべての原子配置における不純物間の結合エネルギーを計算することで安定な複合体構造を探索し，また，原子配置や拡散障壁を考慮することで移動経路を推定した．これにより，ライフタイムの制御性に影響を及ぼす要因についての知見を得ることを目的とした．

計算結果の一例として，C_i と O_i の結合エネルギーを図 1 に示す．横軸は異なる各々の原子配置について付けた番号である．これより，C_i と O_i は互いのジグザグボンド上が安定であることが分かる．O_i が C_i へ移動するときの拡散障壁を図 2 に示す．Si 結晶中の O_i の拡散障壁は 2.5eV 程度[1]であるが，C_i の近傍ではそれよりも低下している．また，C_i と O_i の間には，[110]方向に約 9Å の距離まで引力が働いている．当日は，その他の欠陥形成および構造変化の過程を報告する．

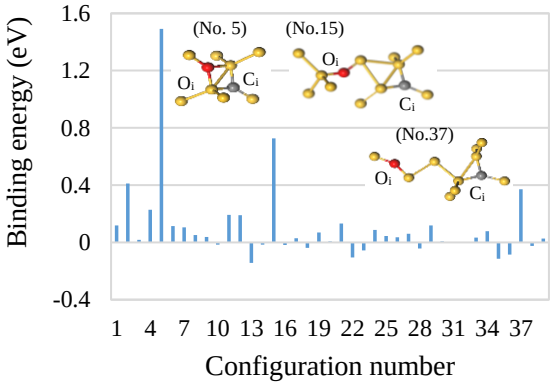


図 1　C_i-O_i の結合エネルギーの配置依存性

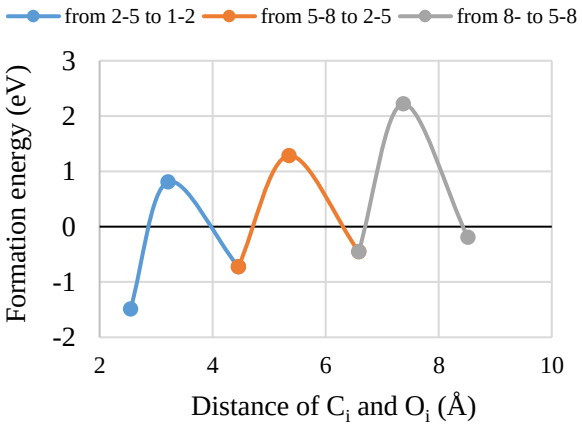


図 2　C_i 近傍の O_i の拡散障壁

参考文献
[1] M. Saito and A. Oshiyama, *Phys. Rev. B*, **38**, (1988) 10711

© 2019年 応用物理学会