

CZ-Si 結晶成長中の点欠陥挙動に与える窒素の影響 (3)

Effect of nitrogen doping on intrinsic point defect behavior in growing CZ-Si crystal

岡山県大院情報系工¹, 岡山県大情報工² 株式会社 SUMCO³

°(M2)谷口元春¹, 末岡浩治², 宝来正隆³

Graduate School of Engineering, Okayama Pref. Univ.¹, Okayama Pref. Univ.²,
SUMCO CORPORATION³

°Motoharu Taniguchi¹, Koji Sueoka², Masataka Hourai³

E-mail: taniguchi.opu@gmail.com

Czochralski (CZ) 法による Si 結晶育成において、窒素 (N) を 10^{14} atoms/cm³ 程度の濃度で添加すると、ボイド欠陥のサイズが低下することが知られている^[1]。しかし、N 添加が Si 結晶成長中の点欠陥濃度に与える影響について、メカニズムには不明な点が多い。

本研究では Si 単結晶成長において、固液界面から取り込まれる N が点欠陥 (V , I) 挙動に与える影響について第一原理計算を行っている。前報^[2]では Sueoka ら^[3]の方法に従って、64 原子からなる立方体モデル内の N 原子の周囲に V および I を配置し、N が点欠陥の形成エネルギーと熱平衡濃度に与える影響について報告した。今回は、この 64 原子モデルの計算でスクリーニングした安定構造を 216 原子モデルによって再計算し、より精密に点欠陥の形成エネルギーを算出した。

前報を含めた主要な結果は次の通りである。(1) N ドープにより V と I の形成エネルギーが低下する。(2) 格子間 N 原子の近傍に V を配置して構造最適化を行うと、N 原子は置換位置に移動する可能性がある。また、置換 N 原子の近傍に I を配置して構造最適化を行うと、N 原子は格子間位置に移動する可能性がある。(3) 216 原子モデルを用いた再計算の結果、例えば図 1 に示す V の結果のように、形成エネルギーが低下する配置がある。以上の結果をもとに、融点における点欠陥の熱平衡濃度を算出した。その結果を図 2 に示すが、 V と I の濃度差 ($C_V^{tot} - C_I^{tot}$) は N 濃度に伴い増加し、その増加分は N 濃度の約 16 % となった。この値は実験で確認されている約 10 % と近い値であった^[1]。

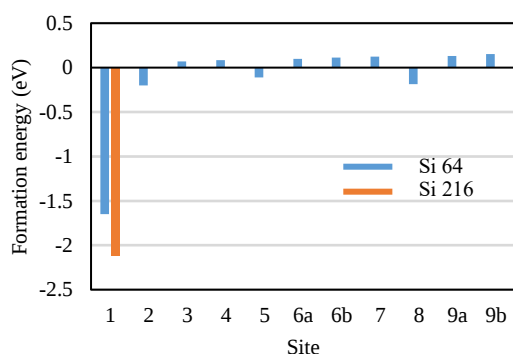


Fig. 1 Recalculation for formation energy of V around N atom in Si 216 atoms model.

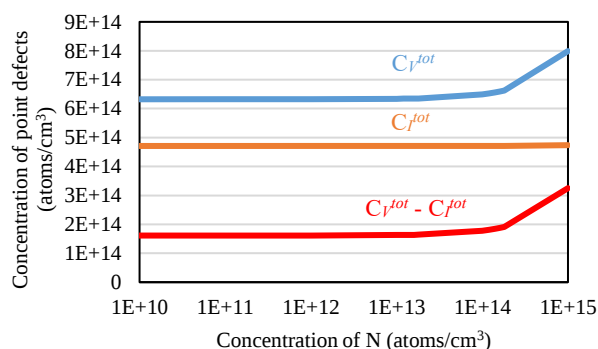


Fig. 2 Recalculation for formation energy of V around N atom in Si model.

[1] K. Nakamura *et al*, *Proceedings of the Forum on the Science and Technology of Silicon Materials* 1999, p.116.

[2] 谷口ら, 第 67 回応用物理学会春季学術講演会(2020), [14p-PB10-3].

[3] K. Sueoka *et al*, *ECS Journal of Solid State Science and Technology* **8** (2019) P228.