

# H ドープ CZ-Si 結晶成長中の点欠陥挙動に関する第一原理解析(3)

## First principles analysis of H-doping impact on intrinsic point defect behavior in growing CZ-Si crystal (3)

岡山県大院情報系工<sup>1</sup>, 岡山県大情報工<sup>2</sup>, 株式会社 SUMCO<sup>3</sup>

○(M2) 楠木琢也<sup>1</sup>, 末岡浩治<sup>2</sup>, 杉村 渉<sup>3</sup>, 宝来正隆<sup>3</sup>

Graduate School of Engineering, Okayama Pref. Univ.<sup>1</sup>, Okayama Pref. Univ.<sup>2</sup>

SUMCO CORPORATION.<sup>3</sup>

○Takuya Kusunoki<sup>1</sup>, Koji Sueoka<sup>2</sup>, Wataru Sugimura<sup>3</sup>, Masataka Hourai.<sup>3</sup>

E-mail: [kusunoki.opu@gmail.com](mailto:kusunoki.opu@gmail.com)

我々は、H ドープが CZ-Si 結晶育成中の点欠陥挙動に与える影響について研究を行っている。前報<sup>(1)</sup>では、H 原子が原子空孔 ( $V$ ) の形成エネルギーに与える影響に関する第一原理計算を行い、H ドープにより  $V$  の形成が促進される結果を得た。

本報では、H 原子が格子間 Si 原子 ( $I$ ) の形成エネルギーに与える影響について第一原理計算を行った。計算では、前報と同様に Si 原子 64 個の立方体モデルを用い、H 原子周囲の各近接位置における  $I$  の形成エネルギーを求めたが、本計算の特筆すべき点として、64 原子からなる立方体モデルにおけるすべての複合体構造(H- $V$  の配置と H- $I$  の配置)を考慮している。このすべての構造についてスクリーニングすることで、点欠陥の形成エネルギーを低下させる主要な複合体構造を求めた。そして、得られた複合体構造について、モデルサイズの影響をより排除するため、Si 原子 216 個の立方体モデルを用いて  $V$  と  $I$  の形成エネルギーを得た。さらに振動エントロピーの計算も行い、Sueoka ら<sup>(2)</sup>の方法に従って、融点における  $V$  と  $I$  の熱平衡濃度の H 原子濃度依存性を得た。

その結果を図 1 に示す。これより、H ドープは  $V$  のみならず  $I$  の濃度も上昇させるが、 $I$  への影響は小さいことがわかる。また、図中には融点における  $V$  と  $I$  の濃度差( $C_V - C_I$ )の H 濃度( $C_H$ )依存性も示している。さらに、 $C_V - C_I$  が  $C_H$  に比例すると考えて先行実験<sup>(3)</sup>と比較した結果を表 1 にまとめた。これより、両者は比較的よい一致を示したことから、H ドープによる CZ-Si 結晶中の  $V$  濃度の増加について、H 原子周囲の点欠陥の形成エネルギーと振動エントロピーの変化により定量的に説明できた。

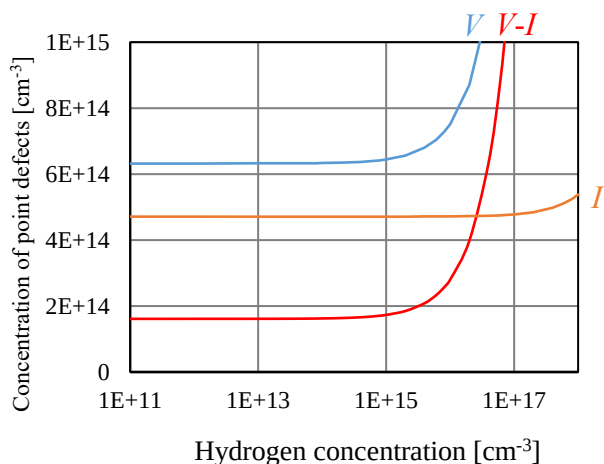


Table 1 Ratio of  $C_V - C_I$  and  $C_H$  at Si melting temperature.

| Experiment            | Calculation           | Cal./Exp. |
|-----------------------|-----------------------|-----------|
| $8.42 \times 10^{-3}$ | $1.19 \times 10^{-2}$ | 1.41      |

Fig. 1 Concentration of  $V$ ,  $I$  at Si melting temperature.

### 参考文献

- (1) 楠木, 末岡, 杉村, 宝来, 第 80 回 応用物理学会秋季学術講演会, (2019) 18p-PB4-1.
- (2) K. Sueoka, Y. Mukaiyama, S. Maeda, M. Iizuka, and V. M. Mamedov, *ECS Journal of Solid State Science and Technology* **8** (2019) P228.
- (3) W. Sugimura, T. Ono, K. Nakamura, M. Hourai, and K. Higashida, in *Proceedings of the Forum on the Science and Technology of Silicon Materials 2014* (Eds: Y. Yoshida, H. Yamada-Kaneta), (2014) p. 248.