Si 固相エピタキシー時に導入される grown-in 欠陥の形成過程

Formation processes of grown-in defects during Si solid phase epitaxy

九工大院工，°(M1)茶圓将史，石丸学
Kyushu Inst. Technol., °Masashi Chaen, Manabu Ishimaru
E-mail: chaen.masashi104@mail.kyutech.jp

【緒言】半導体への不純物添加技術として広く用いられているイオン注入法では、ダメージの蓄積によってアモルファス層が形成されるため、熱処理による結晶性を回復するプロセス(固相エピタキシー)が必要である。高品質な再結晶層を得るため、成長時導入欠陥（grown-in 欠陥）の挙動に関する知見が求められている。本研究では、Si 固相エピタキシャル成長の大規模分子動力学(MD)シミュレーションを行い、grown-in 欠陥の同定およびその形成過程を調べた。

【方法】結晶 Si を 3500K で融解し、300K まで 10^{12}K/s の速度で冷却することにより、アモルファス Si を作製した。これに Si 結晶基板を上下から接合し、1600K で保持することにより、固相エピタキシャル成長のシミュレーションを行った。原子数の総計は 186200 個とし、原子間相互作用は Tersoff ポテンシャルにより算出した。

【結果】Fig. 1 は、(a)固相エピタキシャル成長開始時および(b)完了後における原子配列の(110)断面図で、白はアモルファス、青は結晶領域である。熱処理に伴いアモルファス／固相界面はアモルファス内部に向かって移動し、固相エピタキシャル成長が起こっている。Fig. 1(b)では全体が結晶化しているが、丸で囲ったところに grown-in 欠陥が確認された。Fig. 2 は、grown-in 欠陥の拡大図である。欠陥は五員環と七員環から構成され、全ての Si 原子は 4 配位であることが確認された。原子配列、ボンド長、ボンド角の解析により、本欠陥は I_4 欠陥であることが明らかとなった。I_4 欠陥は照射によって導入されるが、アモルファス Si の固相エピタキシャル成長時の grown-in 欠陥として導入されたという報告はない。I_4 欠陥の形成要因を調べるため、[001]方向からアモルファス／結晶界面を観察したところ、2×1 のダイマー構造に類似した原子配列が存在することが分かった。これよりアモルファス／結晶界面におけるダイマー構造が I_4 欠陥の形成に起因すると考えられる。そこで表面再構成させた基板を用いることで、Fig. 3(a)に示すように表面にダイマー構造を形成し、五員環を導入した。結晶成長に伴って I_4 欠陥の構造が形成され(Fig. 3(b))、残留した(Fig. 3(c))。この結果は、ダイマー構造によって I_4 欠陥の形成が促進することを示唆している。

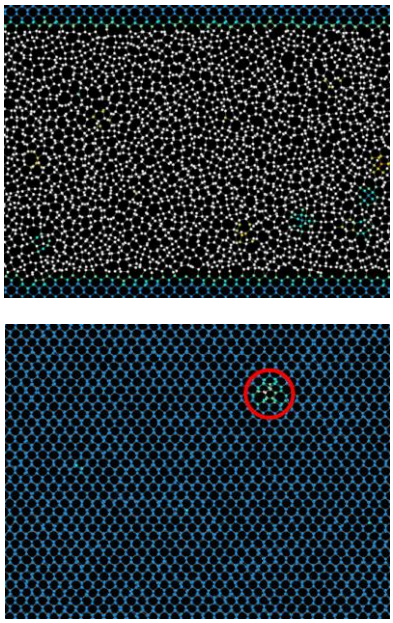

Fig. 1. Crystallization processes at 1600 K. (a) 0 ns, (b) 200 ns.

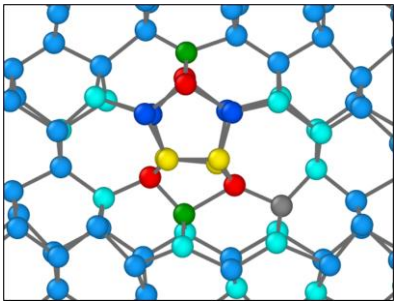

Fig. 2. Residual I_4 defect.

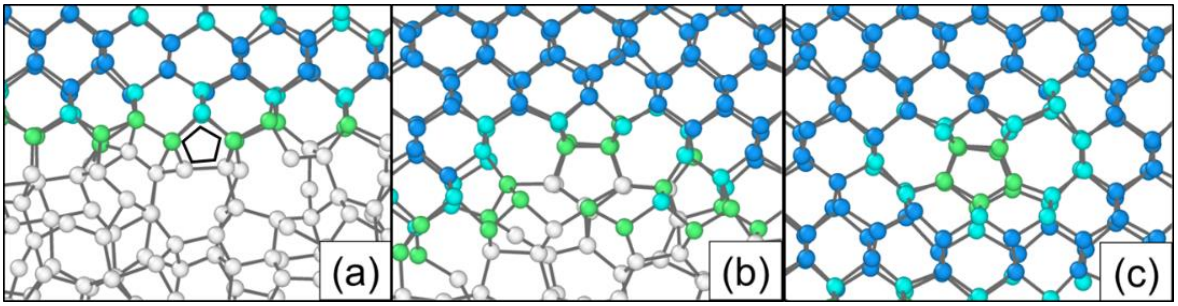

Fig. 3. Formation processes of I4 defects. (a) 0 ns, (b) 12.4 ns, (c) 30.6 ns.

© 2020年 応用物理学会