ANN ポテンシャルによる Si 結晶中の安定な原子空孔クラスターの形態検証

Verification of stable vacancy clusters in Si crystal using ANN potential

岡山県大院情報系工 [1]，名古屋大院工 [2]，金沢学院大経済情報 [3]，岡山県大情報工 [4]
○(M1)後口拓登 [1]，横井達矢 [2]，野田祐輔 [3]，神山栄治 [4]，大櫃万聖 [1]，永倉大樹 [1]，末岡浩治 [4]
Graduate School of Engineering, Okayama Pref. Univ.[1], Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.[2], Kanazawa Gakuin Univ.[3], Okayama Pref. Univ. [4]
°T. Ushiro[1], T. Yokoi[2], Y. Noda[3], E. Kamiyama[4], M. Ohbitsu[1], H. Nagakura[1], K. Sueoka[4]
E-mail: behind.opu@gmail.com

Czochralski 法 Si 単結晶育成において，過剰な原子空孔 (*V*) が凝集してボイド欠陥が形成する．そのため，結晶成長条件を適正化することにより *V* の過飽和度を低下させ，ボイド欠陥の成長を抑制することが行われている[1]．このような先行研究において，理解が不足しているのが *V* クラスターの凝集過程に関する知見である．育成後の結晶中に残留する *V* クラスターはボイド形成・成長の初期，ボイド収縮・消滅の末期の構造のいずれかであろう．従って，これらの安定構造やエネルギーがわかれば，数値シミュレーションも含めたボイド抑制技術の高性能化が期待できる．

V クラスターは実験で検出することが困難であることに加え，原子レベルの扱いが必要であることから，分子シミュレーションによる研究が有望である．本研究では，第一原理計算の結果を学習データとして用い，新たに ANN(Artificial Neural Network) ポテンシャルを作成する[2]．そして ANN ポテンシャルを用いて，ボイド欠陥の起源となる *V* クラスターに関する大規模計算を行う．さらに得られた結果を古典的分子動力学法と比較することにより，ANN ポテンシャルの優位性を明らかにする．

まず，作成した ANN ポテンシャルを用いて，第一原理計算で得られた学習データと比較し，系のエネルギーの平均絶対誤差(MAE ： Mean Absolute Error)を算出した．図 1 に ANN ポテンシャルと第一原理計算の系のエネルギーの相関を示す．学習データのプロットは $x = y$ のごく近傍に分布しており，MAE は系のエネルギーが 7.58 [meV/atom]であった．これより，作成した ANN ポテンシャルは第一原理計算の系のエネルギーを高精度で予測可能と言える．

ANN ポテンシャルを用いた Si 1728~8000 原子モデルにおける *V* クラスターの形成エネルギーを算出した結果を図 2 に示す．これより，(1) *V* の個数が 20 個程度まで HRC (Hexagonal Ring Clusters) 形態が最安定であること，(2) *V* の個数が 20 個程度以上になると HRC 形態と SPC (SPherically shaped Clusters) 形態が安定となり，SF ([111]-oriented Stacking Fault) 形態は不安定となる．その他の結果については，当日報告する．

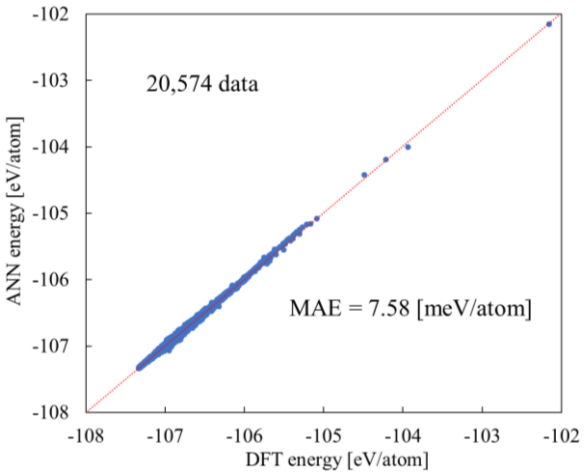

Fig.1 Correlation energy between ANN potential and DFT calculation.

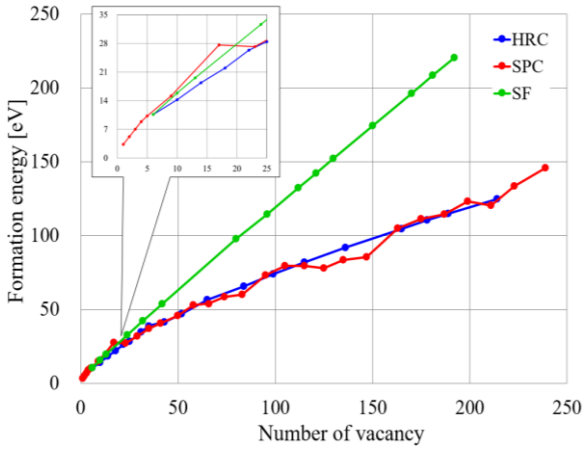

Fig.2 Formation energies of HRC, SPC, and SF vacancy clusters obtained by ANN potential.

参考文献
[1] Hourai *et al.*, *Mater. Sci. Forum* **196–201** (1995) 1713.
[2] Yokoi *et al.*, *Phys. Rev. Mater.* **4** (2020) 014605.

謝辞
本研究では，グローバルウェーハズ・ジャパン株式会社の前田進様，JST-CREST(グラント番号 JPMJCR17J1)にサポートいただきました．