

CZ-Si 単結晶成長中の点欠陥挙動に与える窒素の影響 (2)

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

°(M1)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 法による Si 単結晶育成において, 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. しかし, N 添加により原子空孔 (V) の総濃度が 10% 程度増加することや, それにもかかわらずボイド欠陥のサイズが低下するなど^[1], N 添加が Si 単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(原子空孔 V , 格子間 Si 原子 I)挙動に与える影響に関する第一原理計算を行っている. 前報^[2]では, Si 原子 64 個からなるモデルを用い, N 原子を格子間位置と置換位置に配置してモデルの全エネルギーを求め, その結果から N 原子の最安定位置を決定した. 次に Sueoka らの方法^[3]に基づいて N 原子の周囲に V を配置し, N が V の形成エネルギーと熱平衡濃度に与える影響について研究した. 本報では, N 原子が I に与える影響について同様の計算を行い, V との比較を行った.

前報と本報を併せて, 主要な結果は以下の通りである. (1) Si 結晶中における単独 N の安定位置は, 図 1 に示す [161]D-site, B-site, Sub-site の 3 通りであり, [161] D-site が最安定である^[2]. (2) 図 2 に示すように, N 原子周囲の独立な 36 箇所の I の形成エネルギーも低下する. (3) 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場合があります^[2], 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場合がある.

学会では, N ドープが点欠陥の熱平衡濃度へ与える影響についても報告する.

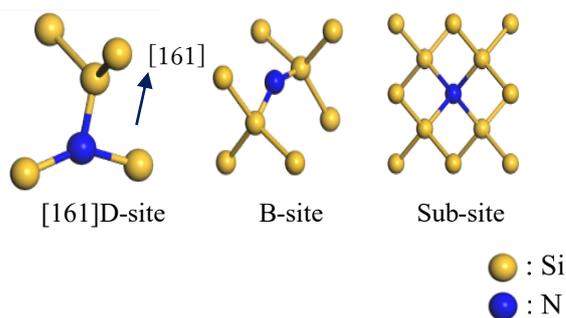


Fig. 1 Atomic configuration of N atom in Si model.

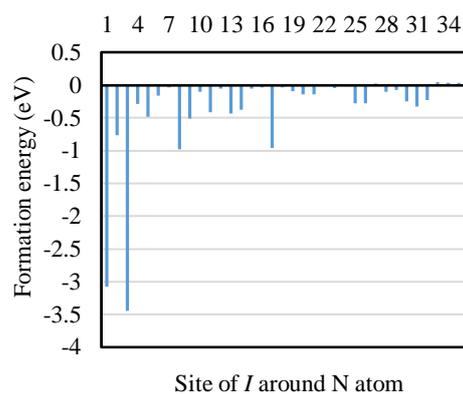


Fig. 2 Formation energy of I around N atom in Si model.

[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 80 回応用物理学会秋季学術講演会(2019), [18p-PB4-2].

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