

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(2) First principles analysis of H-doping impact on intrinsic point defect behavior in growing CZ-Si crystal (2)

岡山県大院情報系工¹, 岡山県大情報工², 株式会社 SUMCO³

○(M1) 楠木琢也¹, 末岡浩治², 杉村 渉³, 宝来正隆³

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

SUMCO COPRATION.³

○Takuya Kusunoki¹, Koji Sueoka², Wataru Sugimura³, Masataka Hourai.³

E-mail: kusunoki.opu@gmail.com

CZ-Si 単結晶育成において、固液界面から固有欠陥(原子空孔 V , 格子間 Si 原子 I)が取り込まれる。先行研究では、H ドープによって(i) Si 結晶がより V 優勢となる、(ii) 転位クラスターの形成が抑制される実験結果が報告されている⁽¹⁾。しかし、H ドープが Si 結晶育成中の点欠陥挙動に与えるこれらの影響について、その理解は不十分である。前報⁽²⁾において我々は、第一原理計算を用いて H 原子が V の形成エネルギーに与える影響について研究した。その結果、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 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。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。

図 1(a)と(b)に、Si 結晶中の H 原子と I の安定位置を示す。さらに、前報と本報において計算した V と I の形成エネルギー等の値を用い、Jahn-Teller 歪みによる配位数の変化と新たに計算した振動エントロピーを考慮し、末岡ら⁽³⁾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 2 に示す。これより、H ドープにより V , I の濃度はともに上昇するが、その効果は V の方が大きいことがわかる。なお、本計算により得られた V と I の濃度差の増加量の H 濃度依存性は、表 1 に示すように先行実験⁽¹⁾と比較的良好一致を示した。

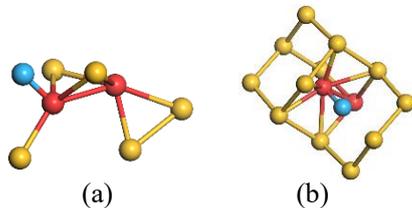


Fig. 1 Two configurations of $\{I, H\}$ in Si. (a) most stable and (b) metastable. Si lattice atoms are shown in yellow and split- $\langle 110 \rangle$ I atoms is shown in red and H atom is shown in light blue.

Table 1 Ratio of (concentration difference of V and I) and H concentration at Si melting temperature.

| Experiment | Calculation | Cal./Exp. |
|-----------------------|-----------------------|-----------|
| 8.42×10^{-3} | 2.24×10^{-2} | 2.66 |

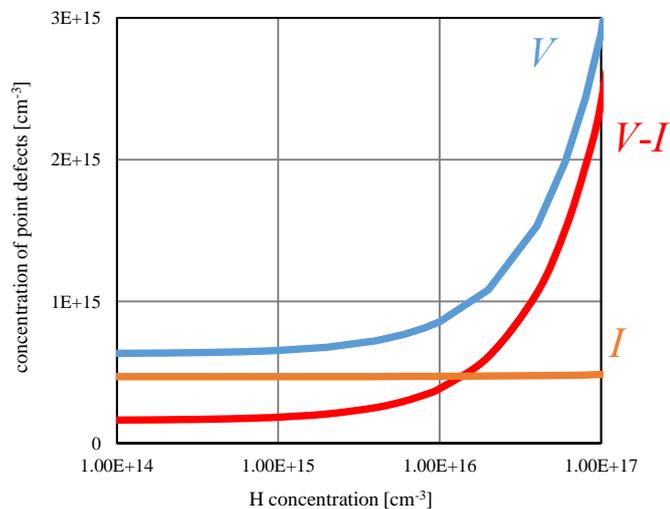


Fig. 2 Concentration of V , I at Si melting temperature.

参考文献

- (1) 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.
- (2) 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.
- (3) K. Sueoka, Y. Mukaiyama, S. Maeda, M. Iizuka, and V. M. Mamedov, *ECS Journal of Solid State Science and Technology* **8** (2019) P228.