

Si 結晶中のドーパントの安定性に与える等方性応力の影響

Effect of Isotropic Stress on Stability of Dopant Atom in 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)岩城浩也¹, 末岡浩治², 鳥越和尚³, 小野敏昭³

Graduate School of Engineering, Okayama Pref. Univ.¹, Okayama Pref. Univ.²,
SUMCO CORPORATION³

○Hiroya Iwashiro¹, Koji Sueoka², Kazuhisa Torigoe³, Toshiaki Ono³

E-mail: iwashiro.opu@gmail.com

CZ 法による Si インゴット育成の際に生じる熱応力や, LSI の微細化に伴い Si ウェーハ表面近傍に付加される応力が点欠陥や不純物の挙動に影響を与えることが知られている. 応力下における点欠陥や不純物の制御は Si 結晶の高品位化や LSI の高性能化に重要であり, 基礎データの蓄積が求められている. そこで, 本研究では GPa オーダーの外部応力及び MPa オーダーの熱応力が Si 結晶中のドーパントの安定性に与える影響を第一原理計算によって明らかにすることを目的とした.

計算モデルとして Si 原子 64 個からなる立方体モデルを用意した. そして, ドーパント原子 1 個をモデルに導入し, 第一原理計算により全エネルギーと体積変化量(緩和体積)を求めた. さらに, これらの計算結果からドーパントの形成エンタルピーの応力依存性を算出した. 本研究ではドーパントである B, P, As に加え, Si 結晶中における重要な軽元素である O, C, H, N を含めた計 7 種類のドーパントを扱った. 計算において, -3.0 GPa (圧縮) ~ +3.0 GPa (引っ張り), -30 MPa (圧縮) ~ +30 MPa (引っ張り) の等方性応力 σ を負荷した.

計算結果の例として O, C, B, P, As の緩和体積の応力依存性を図 1 に示す. O は B-site に, C, B, P, As は Sub-site に位置している. これより, これらの原子の緩和体積は応力に依存していることが分かる. また, 前報[1]の金属の結果と比較すると, O, C, B, P, As の原子半径は金属の原子半径より小さいが, 緩和体積の値は金属より大きいことが分かる. この理由は, B-site に位置する O 原子や Sub-site に位置する C, B, P, As 原子は, 主として T-site に位置する金属原子よりも Si-Si 原子間の結合に強い影響を与えるためと考えられる. なお, 形成エネルギーは応力にほとんど依存しなかった.

形成エンタルピーは形成エネルギーと体積変化によるエネルギーの和で定義され, 式(1)で表記される. ここで, H_f は形成エンタルピー, E_f は形成エネルギー, σ は応力, ΔV は緩和体積を示す.

$$H_f = E_f - \sigma \times \Delta V \quad (1)$$

得られた形成エンタルピーについて, 応力を負荷しない時を基準として図 2 に示す. これより, O 原子は圧縮応力において形成エンタルピーが増加し,引っ張り応力において形成エンタルピーが減少していることが分かる. 一方, C, B, P 原子について, 圧縮応力において形成エンタルピーが減少し,引っ張り応力において形成エンタルピーが増加していることが分かる. 原子空孔(V)や格子間シリコン(I)の計算結果[2]と比較すると, C の形成エンタルピーは V に近い応力依存性を示し, O の形成エンタルピーは I に近い応力依存性を示した.

なお, H と N 原子に関する計算結果や, MPa オーダーの計算結果は当日報告する.

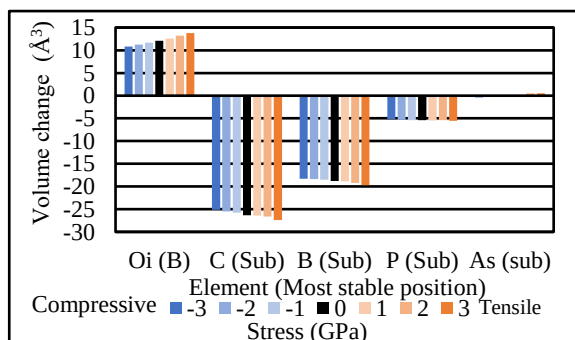


Fig. 1 Stress dependence of volume change.

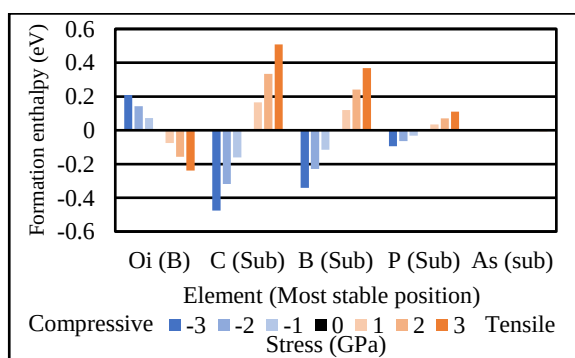


Fig. 2 Stress dependence of formation enthalpy.

参考文献

1. 岩城他, 2019 年秋応用物理学会予稿 18p-PB4-5.
2. K. Sueoka, E. Kamiyama, P. Spiewak, and J. Vanhellefont, ECS J. Solid State Sci. and Tech, 5(4), P3176-P3195, (2016).