

ANN ポテンシャルを用いた Si 結晶中の原子空孔クラスターに関する大規模計算(3)

Large-scale atomic level calculation of vacancy clusters

in Si crystal using ANN potential (3)

岡山県大院情報系工¹, 名古屋大院工², 岡山県大情報工³

○(M2) 後口拓登¹, 横井達矢², 野田祐輔³, 神山栄治³, 大櫃万聖¹, 永倉大樹¹, 末岡浩治³

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

Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.², Okayama Pref. Univ.³

°T. Ushiro¹, T. Yokoi², Y. Noda³, E. Kamiyama³, M. Ohbitsu¹, H. Nagakura¹, K. Sueoka³

E-mail: behind.opu@gmail.com

Czochralski 法 Si 単結晶育成において, 原子空孔 (V) がクラスター化してボイド欠陥へと成長する過程を原子レベルで理解することは, 産業的な観点からも重要な課題となっている. 原子レベルの計算では密度汎関数法 (DFT) の精度が最も高いが, 計算コストが大きく, 数十個の V クラスターが計算の限界である.

我々は前回までに^[1], DFT の結果を学習データとして作成した Artificial Neural Network (ANN) ポテンシャル^[2]を用い, 400 個程度までの V クラスターに関する大規模計算を行った. 今回は, 学習データを見直すことで V 35 個までの DFT との差異を低下させ, さらに最大 969 個の V クラスターの計算を行うことで, V クラスターの成長過程を解明することを目的とした. V クラスターの形態を図 1 に示す. なお, V の個数が 35 個のとき, SPC 形態と HRC 形態は同一となる. また SF 形態も扱った.

ANN ポテンシャルによる各 V クラスターの形成エネルギーの計算結果を図 2 に示す. 計算では, V クラスターのサイズに応じてモデルの Si 原子数を 64~32,768 個の範囲で変化させている. これより, V が 20 個程度以上で SF 形態のエネルギーが最も大きいことや, V 300 個~969 個の範囲では, 構造最適化後のダングリングボンドがより少なくなる SPC の方が HRC よりも安定であることなどがわかる. なお, 実際に観測されるボイド欠陥は{111}面で囲まれた正八面体構造であり, これは SPC と HRC が成長する際に周期的に現れる形態と同一である. 古典的分子動力学法に対する ANN ポテンシャルの優位性などについては当日報告する.

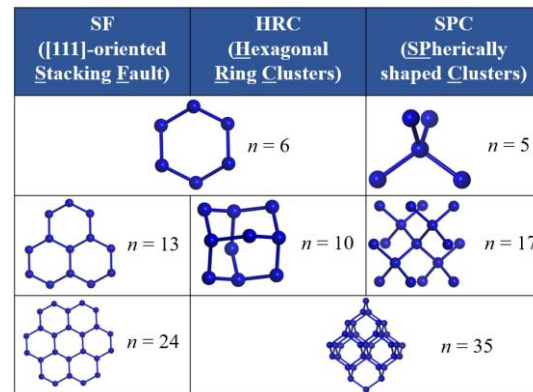


Fig. 1 Configuration of vacancy cluster growth modes.

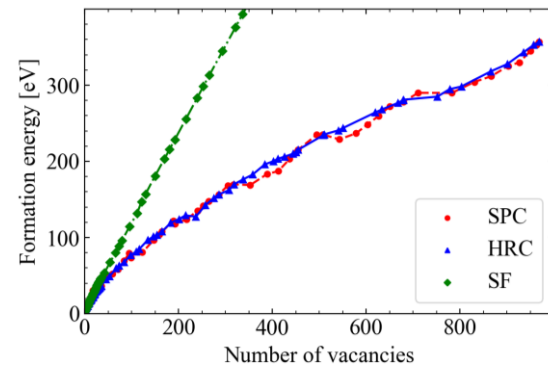


Fig. 2 Formation energies of SPC, HRC, and SF vacancy clusters obtained by ANN potential.

参考文献

- [1] 後口他, 第 68 回応用物理学会春季学術講演会 19p-Z29-11 (2021).
- [2] Yokoi et al., *Phys. Rev. Mater.* **4** (2020) 014605.

謝辞

グローバルウェーハズ・ジャパン株式会社の前田進様に有益な議論をして頂きました. 本研究は JST-CREST(Grant No. JPMJCR17J1)の支援を受けました.