

ANN ポテンシャルによる Si 結晶中の拡張格子欠陥の安定性解析

ANN potential analysis on stability of extended interstitial defects in Si crystal

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) 大櫃万聖¹, 横井達矢², 神山栄治³, 後口拓登¹, 永倉大樹¹, 野田祐輔³, 末岡浩治³Graduate School of Engineering, Okayama Pref. Univ.¹, Graduate School of Engineering,Nagoya Univ.², Okayama Pref. Univ.³○M. Ohbitsu¹, T. Yokoi², E. Kamiyama³, T. Ushiro¹, H. Nagakura¹, Y. Noda³, K. Sueoka³

E-mail: obitsu1007@gmail.com

Si ウェーハにイオン注入を施すと, 内部に格子間 Si 原子 (I) が生成する. この I はその後の熱処理によって凝集し, 格子間型の拡張欠陥 (Extended Interstitial Defects, EID) へと成長する. EID はリーク電流を増加させるため, デバイスの性能を低下させる. また, ドープントの増速拡散や電気的無活性化を引き起こす要因となる. 従って, デバイスの高性能化には EID の形成メカニズムを理解することが必須である.

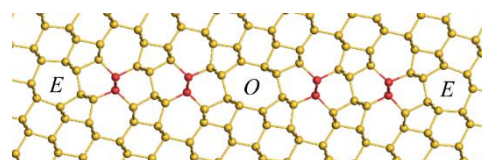
EID の構造について, 透過型電子顕微鏡(TEM) や計算機シミュレーションによる先行研究が報告されている[1]. それによると, 代表的な EID は [113]棒状欠陥(rod-like defect, RLD), [111] RLD, [111] Frank-loop, [001] defect である. また, 計算機シミュレーションを用いて, これらの欠陥の安定性が比較されている. ただし, 計算モデルのサイズに制約があることから, 現実には有限サイズの欠陥であるものの, 周期境界条件によって無限サイズの欠陥に近似して扱われている[2].

最近, 第一原理計算(DFT)の結果を学習データとした Artificial Neural Network(ANN)ポテンシャルは, DFT に準ずる精度での計算が可能であるとともに, DFT と比較して計算コストの面で非常に有利であることが報告されている[3]. すなわち, ANN ポテンシャルを用いることにより, 大規模なモデルを用いた安定性の比較が可能となっている.

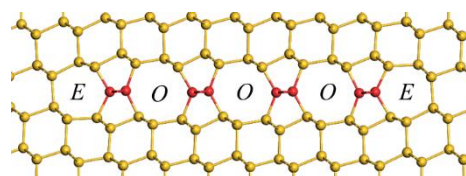
そこで本研究では, DFT の結果を学習データとして構築した ANN ポテンシャルを用い, 図 1 に断面図を示す全方位を Si 結晶で囲まれた有限長の EID について安定性を比較した. 構築した ANN ポテンシャルについて, まず $I_2 \sim I_{10}$ コンパクトクラスターのエネルギーを計算したが, 図 2 に示すように DFT と定量的に一致を示した. なお, 図中に古典的分子動力学法(SW と Tersoff ポテンシャル)の結果も示すが, DFT, ANN からの乖離が見られる. コンパクトクラスターとの比較も含めて, EID の計算結果は当日報告する.

参考文献

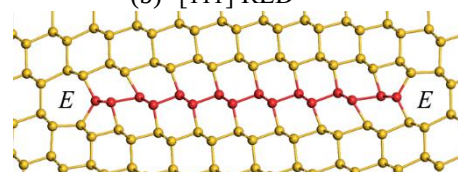
- [1] Santos *et al.*, *J. Electron. Mater.* **47** (2018) 4955.
- [2] Park *et al.*, *Phys. Rev. B* **79** (2009) 241203.
- [3] Yokoi *et al.*, *Phys. Rev. Mater.* **4** (2020) 014605.



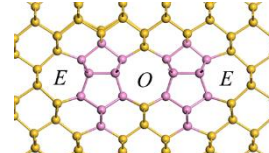
(a) [113] RLD



(b) [111] RLD

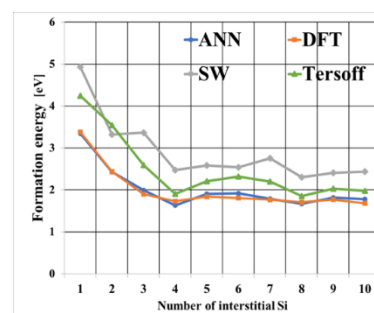


(c) [111] Frank-loop



(d) [001] defect

Fig. 1 A cross section of EIDs .

Fig. 2 Formation energies of I and $I_2 \sim I_{10}$ compact clusters obtained by ANN potential.

謝辞

グローバルウェーブ・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.