

窒素添加 CZ-Si 結晶育成中のボイド形成に与える酸素の影響

Impact of Interstitial Oxygen on Void Reduction Effect of Nitrogen
in Czochralski Silicon Single Crystals岡山県大院情報系工¹, 岡山県大情報工², 株式会社 SUMCO³°佐田 晃¹, 野田 祐輔², 末岡 浩治², 梶原 薫³, 宝来 正隆³Graduate School of Computer Science and Systems Engineering, Okayama Pref. Univ.¹, Department of Information and Communication Engineering, Okayama Pref. Univ.², SUMCO Corporation³°Akira Sada¹, Yusuke Noda², Koji Sueoka², Kaoru Kajiwara³, Masataka Hourai³

E-mail: akira.sd.sub2192@gmail.com

Si 結晶育成中に添加した窒素 (N) は原子空孔 (V) の凝集を抑制し, ボイド欠陥のサイズを低下させる^[1]. 最近, CZ 法に起因して Si 結晶中に取り込まれる酸素 (O) 濃度の上昇に伴い, N によるボイド抑制効果が弱まることが報告された^[2]. しかしながら, N, V, O が関与したこれらの現象に関して系統的な解析は行われておらず, メカニズムには不明な点が多い.

本研究では, Si 結晶中の N, V, O が関与する一連の複合体について, 第一原理計算を行っている. 前報^[3]では, O が N-V 複合体の構造変化に与える影響について, エネルギー障壁を比較することで考察した. 本報ではこれまでの総括として, 計算結果から推定した N のボイド抑制効果と O がその効果を弱めるメカニズムを考察する.

Fig. 1 に計算によって得られた複合体の安定構造と結合エネルギーをまとめた. ST-0, ST-1, ST-3, ST-5, ST-6, ST-7 は N-V 複合体の安定構造である. この中で, ST-0, ST-3, ST-6 はそれぞれ N₂, N₂-V, N₂-V₂ の最安定構造である. また ST-1 は構造変化によって ST-3 に変化する場合は, 2 個目の V との結合で ST-5 や ST-7 に変化する場合は考えられる. そこで, N-V 複合体が O と結合するタイミングとして ST-0, 1, 3, 6 の 4 通りを考えた.

予稿に結果を示さないが, エネルギー障壁の結果も考慮すると, 次のようなボイド抑制メカニズムが推察される. N と V との反応において N は N₂, N₂-V, N₂-V₂ と成長して安定化するが, 一旦 N₂-V や N₂-V₂ が最安定構造を形成すると, V が N-V 複合体から解離するには大きな障壁を超えるエネルギーが必要となる. 結果的にボイド形成に関与する V が減少することで, ボイドのサイズが小さくなる. さらに O との反応では, N 原子の周囲で O が安定化すると, O 周辺の原子が動きにくくなり, 複数種の N-V-O 複合体が形成される. 最安定構造以外の複合体では N が V を束縛する力も弱くなるため, ボイド形成に寄与するフリーな V が増加すると考えられる. これが O が N のボイド抑制効果を低下させる要因となる.

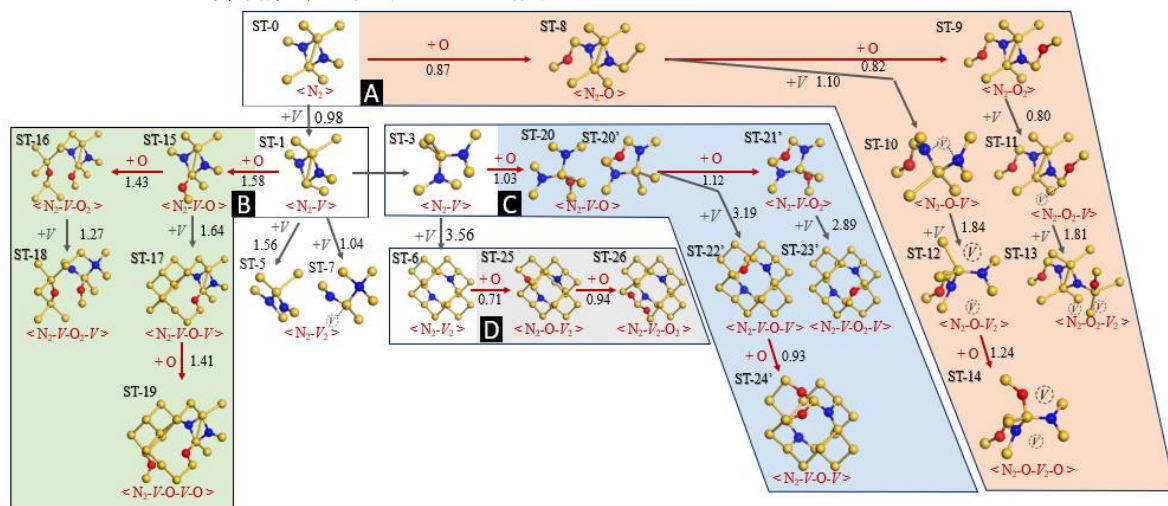


Fig. 1 Stable structures and binding energy of N-O-V complexes (N: blue balls, O: red balls, Si: yellow balls).

- [1] K. Nakamura *et al.*, *Proceedings of the Forum on the Science and Technology of Silicon Materials 2003* (2003) 161 (and references therein).
 [2] K. Kajiwara *et al.*, *J. Cryst. Growth* **570** (2021) 126236.
 [3] 佐田, 野田, 末岡, 梶原, 宝来, 第 83 回応用物理学会秋季学術講演会 (2022) 20p-C202-2.