

Si 結晶中の自己格子間原子の凝集に関する ANN ポテンシャル解析

ANN potential analysis on clustering of self-interstitial atoms in Si crystal

○(M1) 山中一希¹, 横井達矢², 神山栄治³, 野田祐輔³, 末岡浩治³

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

Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.²,

Faculty of Computer Science and Systems Engineering, Okayama Pref. Univ.³

○K. Yamanaka¹, T. Yokoi², E. Kamiyama³, Y. Noda³, K. Sueoka³

E-mail: OPU.Yamanaka@gmail.com

イオン注入等で Si ウェーハに導入される自己格子間原子(I)は、凝集して I クラスタや I 型拡張欠陥へと成長し、デバイスの性能に影響を与える。そのため、 I の凝集メカニズムを解明することは重要な課題となっている。本研究では、密度汎関数理論(DFT)に基づく第一原理計算に準ずる精度を有し、計算コストが圧倒的に有利な人工ニューラルネットワーク(ANN)を用いて作成した原子間ポテンシャル[1-3]を用い、 I の凝集初期、すなわち I と I 、 I_2 ペアと I 、 I_3 クラスタと I の各反応における結合エネルギーの計算を行った。

計算には 1,000 原子からなる Si 結晶の立方体モデルを採用した。このモデルの中心付近に DFT で決定した I 、 I_2 ペアあるいは I_3 クラスタの最安定構造[4]を配置し、さらに結晶の対称性を考慮して各々の周囲 64 箇所に他の I 原子を[110] Dumbbell-site に配置した。これらの初期モデルについて ANN ポテンシャルによる構造最適化計算を行い、得られた各安定配置における結合エネルギーを算出した。図 1 に構造最適化後の I と I 、 I_2 ペアと I 、 I_3 クラスタと I の各距離と結合エネルギーの関係を表す。これより、 I 、 I_2 ペア、 I_3 クラスタの各々与其他の I との距離が約 8 Å 以下になると相互作用が生じていることがわかる。すなわち、 I 、 I_2 ペア、 I_3 クラスタによる他の I の捕獲距離は約 8 Å であると言える。なお、 I_3 クラスタ与其他の I との構造最適化計算では、 I の配置によらず、報告されている最安定の I_4 クラスタに到達しないことも確認できた。

参考文献

- [1] J. Behler, *Int. J. Quantum Chem.* **115**, 1032 (2015).
- [2] T. Yokoi *et al.*, *Phys. Rev. Mater.* **4**, 014605 (2020).
- [3] M. Ohbitsu, *et al.*, *Scr. Mater.* **214**, 114650 (2022).
- [4] S. Lee, *et al.*, *Phys. Rev. B* **77**, 085210 (2008)

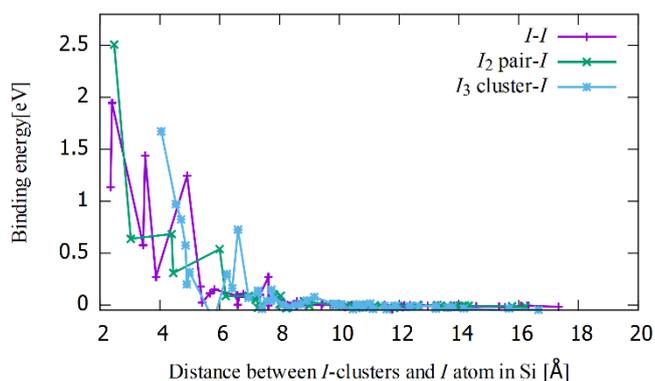


Fig. 1 Relationship between distance and binding energy of I , I_2 pair, I_3 cluster and I in Si.