Si 単結晶中の真性点欠陥凝集の第一原理フェーズフィールド計算

First-Principles Phase-Field Simulations on Aggregation of Intrinsic Point Defects in Si Single Crystals

岡山県立大情報工 [1]，ダッソー・システムズ [2]，物材機構構造材料 [3]，横浜国大院工 [4]，
○野田 祐輔 [1]，桑原 理一 [2]，佐原 亮二 [3]，末岡 浩治 [1]，大野 かおる [4]
Okayama Pref. Univ. [1], Dassault Systèmes K. K. [2], Nat. Inst. Mater. Sci. [3], Yokohama Nat. Univ. [4],
°Yusuke Noda[1], Riichi Kuwahara[2], Ryoji Sahara[3], Koji Sueoka[1], Kaoru Ohno[4]
E-mail: noda@c.oka-pu.ac.jp

Czochralski 法による Si 単結晶成長の過程では様々な欠陥が形成され，Si ウェーハの品質劣化を引き起こすことが知られている．Si 単結晶中に形成される代表的な欠陥は原子空孔と格子間 Si 欠陥であり，これらの欠陥は凝集してボイド欠陥[1]や拡張格子欠陥[2]を形成し，半導体デバイスの性能に悪影響を与える．半導体中の欠陥に関する解析手法として密度汎関数理論に基づく第一原理計算が広く用いられる．しかし，第一原理計算ではナノスケールサイズの結晶構造を仮定したシミュレーションしか実行できず，マクロスケールでの欠陥構造の詳細を解析することは難しい．

上記の問題点を解決するために，本研究では第一原理フェーズフィールド（FPPF）法を用いた Si 単結晶中の原子空孔欠陥（V）・格子間 Si 欠陥の凝集のシミュレーションを実行する．従来のフェーズフィールド（PF）法とは異なり，FPPF 法では経験的パラメータを使わずに第一原理計算から得られるクラスター構造のエネルギー値に基づいて PF のシミュレーションを実行でき，先行研究では Ni–Al 合金などの微細構造解析に成功している[3-7]．図 1 は任意の Si：V 比における Si の PF 変数の分布を示しており，原子空孔欠陥（図 1(a)の青色）や格子間 Si 欠陥（図 1(b)の淡い赤色）が凝集する様子を捉えることができた．FPPF 法の計算結果の詳細は当日の発表にて報告する．

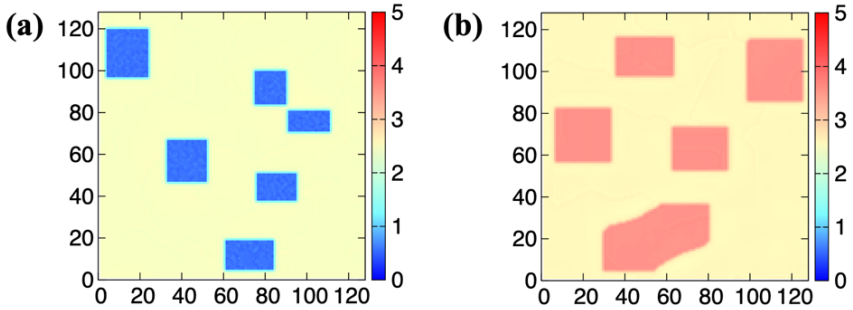

Fig. 1 PF variable for Si in FPPF simulations for (a) Si-deficient composition (Si:V = 1.70:2.30) and (b) Si-excess composition (Si:V = 2.30:1.70). The color bar indicates the silicon concentration ($0 < \varphi_{Si} < 5$).

参考文献

[1] H. Nishikawa et al., *Jpn. J. Appl. Phys.* **36**, 6595 (1997).; [2] H. Park et al., *Phys. Rev. B* **79**, 241203 (2009).; [3] S. Bhattacharyya et al., *Nat. Commun.* **10**, 3451 (2019).; [4] T. N. Pham et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **32**, 264001 (2020). [5] K. Ohno et al., *Comput. Mater. Sci.* **191**, 110284 (2021).; [6] T. N. Pham et al., *Acta Mater.* **215**, 117050 (2021). [7] K. Ohno et al., *Sci. Rep.* **12**, 10070 (2022).

© 2023年 応用物理学会