

# 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(2)

## Large-scale atomic level calculation of vacancy clusters

### in Si crystal using ANN potential (2)

岡山県大院情報系工<sup>1</sup>, 名古屋大院工<sup>2</sup>, 金沢学院大経済情報<sup>3</sup>, 岡山県大情報工<sup>4</sup>

○(M1)後口拓登<sup>1</sup>, 横井達矢<sup>2</sup>, 野田祐輔<sup>3</sup>, 神山栄治<sup>4</sup>, 大櫃万聖<sup>1</sup>, 永倉大樹<sup>1</sup>, 末岡浩治<sup>4</sup>

Graduate School of Engineering, Okayama Pref. Univ.<sup>1</sup>, Graduate School of Engineering,

Nagoya Univ.<sup>2</sup>, Kanazawa Gakuin Univ.<sup>3</sup>, Okayama Pref. Univ.<sup>4</sup>

°T. Ushiro<sup>1</sup>, T. Yokoi<sup>2</sup>, Y. Noda<sup>3</sup>, E. Kamiyama<sup>4</sup>, M. Ohbitsu<sup>1</sup>, H. Nagakura<sup>1</sup>, K. Sueoka<sup>4</sup>

E-mail: behind.opu@gmail.com

Czochralski 法 Si 単結晶育成において, 原子空孔 (V) が凝集してポイド欠陥へと凝集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。

前回<sup>[1]</sup>, 我々は密度汎関数法に基づく第一原理計算 (DFT) の結果を元に作成した ANN (Artificial Neural Network) ポテンシャル<sup>[2]</sup>を用いて Si 単結晶中の V クラスターに関する大規模計算を行った。しかし, その ANN ポテンシャルでは, SPC (SPherically shaped Clusters) 形態の一部で計算ができない場合があった。今回は, DFT の学習データとして分子動力学法 (DFT-MD) や表面モデルの計算結果を追加し, ANN ポテンシャルの適用範囲の拡大と, さらなる精度の向上を目指した。計算対象とした V クラスターの形態を図 1 に示す。今回, SPC 形態として, ダングリングボンド数の増加レートが最も小さい SPC1 形態と, モデルの中心から順番に Si 原子を取り除く SPC2 形態の 2 種類を扱った。なお, V の個数が 35 個のとき, SPC1 形態と HRC (Hexagonal Ring Clusters) 形態は同一となる。また SF ([111]-oriented Stacking Fault) 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。ここで, V クラスターのサイズに応じてモデルの Si 原子数を 64 個~8000 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くなることや, V 200 個~400 個の範囲では SPC1 と HRC の形成エネルギーの差はごく僅かであり, この 2 形態が安定であることなどがわかる。なお, 実際に観測されるポイド欠陥は {111} 面で囲まれた正八面体構造であり, これは HRC が成長した形態と同一である。古典的分子動力学法に対する優位性などについては当日報告する。

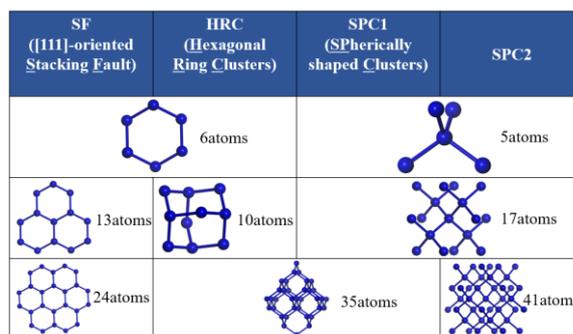


Fig.1 Configuration of vacancy cluster growth modes.

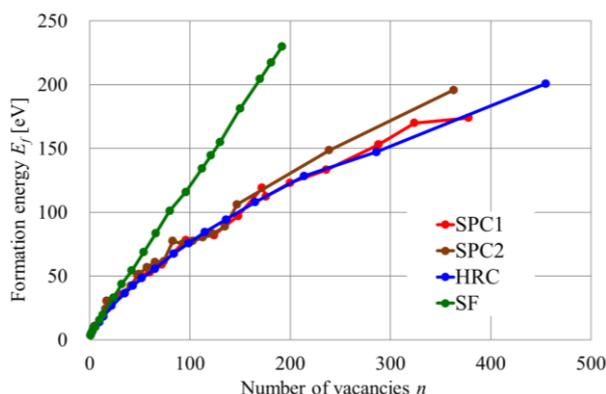


Fig.2 Formation energies of SPC1, SPC2, HRC and SF vacancy clusters obtained by ANN potential.

[1] 後口他, 第 81 回応用物理学会秋季学術講演会 11p-Z12-9 (2020).

[2] Yokoi *et al.*, *Phys. Rev. Mater.* **4** (2020)014605.

謝辞

グローバルウェーブズ・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。