

As-grown Si 単結晶中の格子間 Si 系欠陥形態の考察

Structural consideration of self-interstitial-type defects in as-grown Si crystals

グローバルウェーハズ・ジャパン¹, 岡山県大情報工² ○神山 栄治^{1, 2}, 末岡 浩治²

GlobalWafers Japan Co., Ltd.¹, Okayama Pref. Univ.², °E. Kamiyama^{1, 2}, K. Sueoka²

E-mail: ejkamiyama@aol.com

1. 背景

ポストムーア時代の新しいデバイスの出現は、出発基板としての Si ウェーハに、原子レベルのきめ細やかな制御を要求する可能性があり、改めて as-grown 結晶に残留しうる欠陥について詳しく理解することが重要となっている。as-grown 結晶に含有しうる欠陥は、空孔系と格子間 Si 系の 2 種に大別される。前者については、既に空孔 969 個までの凝集体の計算¹がなされており、数十～数百 nm サイズの Void 欠陥への成長過程の理解がかなり進んでいる。一方格子間 Si 系については、高々十数個程度であり^{2, 3}、ミクロンオーダーで観察される典型的な転位クラスターやその核となる面状{111}欠陥である Frank partial Dislocation Loop (FDL)⁴⁻⁶までの成長過程が十分に理解されているとは言えない。本報告では、第一原理計算で扱える範囲にて、FDL の形態とその形成過程についての考察を行う。

2. FDL 欠陥形成過程の疑問

図 1 に<111>方向への積層順の障害である積層欠陥 (SF: Stacking Faults)のモデルを示す。図 1 (a)の Si 72 原子の無欠陥モデルをもとに、Si 原子を C-C'の 2 層 (Si8 原子) 追加し、3 次元周期境界条件を課すことで、FDL 欠陥の Loop 内側の原子配列を表現したものが図 1(b)である。一般に欠陥起因の応力は周囲の無欠陥 Si 領域で緩和されるが、FDL の形成過程で、いきなり原子 2 層分の SF (FDL) が形成可能であるか、甚だ疑問である。

3. FDL 欠陥の前駆体・中間体の可能性

図 1(b)と異なり、A'の 1 層 (Si 4 原子) だけ追加したモデルが図 1(c)である。この形成可能性を検討するために、1(b)と 1(c)の各々に対して、完全に応力緩和させる条件 (=形成エネルギーMin.) と、セルサイズを完全結晶(a)に固定した条件 (=形成エネルギーMax.) での追加 Si 1 個当たりの形成エネルギーを得られたセル内応力に対してプロットしたものが図 2 である。当日は以上の結果をもとに、as-grown Si 結晶内での格子間 Si の凝集現象について論じる。

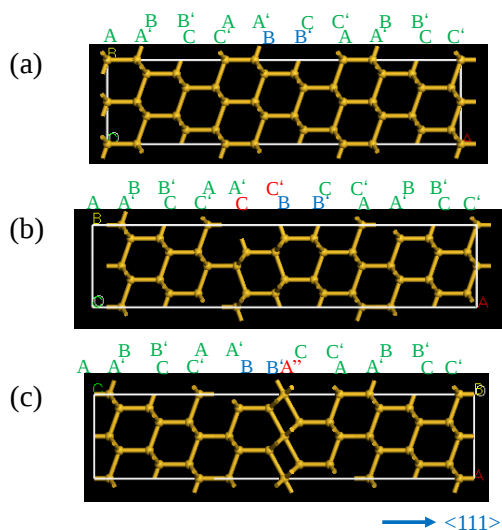


図 1 無欠陥モデルと積層欠陥のモデル

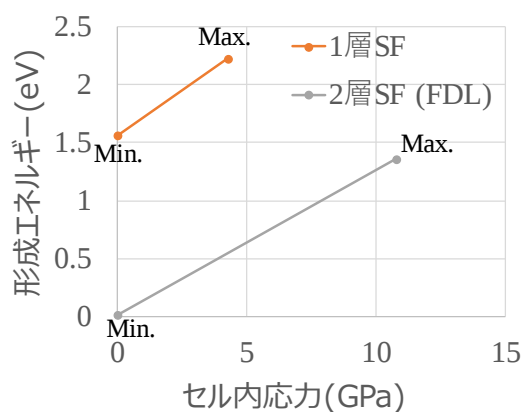


図 2 1 層/2 層 SF の形成エネルギー変化範囲

参考文献

- [1] M. Prasad et al., *Appl. Phys. Lett.* **80** 1951 (2002). [2] L. Bongiorno, et al., *Europhysics Letters* **50** 608 (2000). [3] J. Kim, et al., *Phys. Rev. Lett.* **84** 503 (2000). [4] M. Hourai, et al., *J. Electron. Mater.*, **49** 5110 (2020). [5] K. Nakai, et al., *J. Cryst. Growth* **210**, 20 (2000). [6] S.S. Kapur et al., *Phys. Rev.* **B82**, 045206 (2010).