

## P, Bを含んだSi結晶の積層欠陥エネルギーの第一原理計算

関西学院大・理工 ○西谷滋人, 戸賀瀬健介(院生),  
東北大金研 大野裕, 徳本有紀, 米永一郎

First principles calculations of stacking fault energies of P and B doped Si crystals.

Kwansei Gakuin Univ., Shigeto R. Nishitani, Kensuke Togase,  
Tohoku Univ., Yutaka Ohno, Yuki Tokumoto, Ichiro Yonenaga.

【背景】最近, リン(P)をドーブしたSi単結晶中の転位芯の分解挙動を, 大野らが電子顕微鏡によって詳しく観察した. それによると焼鈍時間が伸びるにしたがって転位芯の分解幅が増加する傾向を示している[1]. これは, Pの積層欠陥への拡散によると考えられる. この仮説を計算で確認するため, 第一原理計算で積層欠陥の振る舞いを調べた.

【計算手法】積層欠陥を含んだ16層で構成するスラブモデルを作った. 第一原理計算はVASPで, カットオフエネルギー1000eV, PAW近似を用いた. Pを各層に配置してそのエネルギー, 層間距離を調べた.

【結果】図1は第1層から第16層を横軸にとり, 1つの層のSiをすべてPに置き換えた場合の計算結果である. 積層欠陥はh(hexagonal)と記した9-12層に導入している. 縦軸にPをそれぞれの層で置換したモデル(ESF-Si(P))と, Pをいれていないモデル(ESF-Si)とのエネルギー差を表示している. これから明らかなように, hと記した積層欠陥領域にPをおいた場合に, エネルギーは0.1eV程度下がっていることがわかる. これより, Pは積層欠陥領域に濃化する傾向が強いことが確認された. さらにBを含んだ場合も報告する.

[1] Y. Ohno, T. Taishi, Y. Tokumoto, and I. Yonenaga, J. Appl. Phys. 108(2010), 073514.

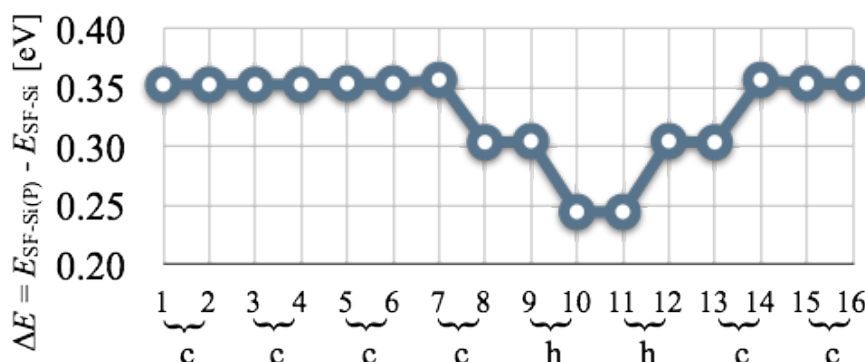


図1 Pの置換位置によるエネルギー変化.