

第一原理計算による Si 中の Cu 析出物の相安定性

関西学院大・理工 谷口 僚, 西谷 滋人
 東北大・金研 大野 裕, 米永 一郎

First principles calculations of the copper silicide precipitates,

Kwansei gakuin University, Ryo Taniguchi, Shigeto. R. Nishitani
 Tohoku University, Yutaka Ohno, Ichiro Yonenaga

【緒言】 Cu を比較的高濃度含んだ Si 単結晶中に、 Cu_3Si の組成を持った析出物が観察された。本研究では、このような化合物が生成可能であるかを、いくつかの結晶構造モデルを用いて、第一原理計算により検討した。

【結晶構造】 Zintl 相の立方晶構造における原子配列パターンから、図 1 に示した通り、bcc 構造の一種である D0_3 型と fcc 構造の一種である L1_2 型の 2 種類の結晶構造モデルを採用した。それに加えて、安定とされる η 相の化合物モデル (Cu_7Si_2) も計算した。

【手法】 それぞれの立方晶モデルに対し、外部・内部緩和を考慮した第一原理電子構造計算を VASP を用いて行った。結晶の格子定数やエネルギー、状態密度分布を調べた。

【結果】 図 2 に示したように、2 種類の Cu_3Si モデルは偏析極限よりも安定であるため、生成可能であるという結論が得られた。この 2 種類のモデルを比較すると、 L1_2 型モデルのほうが D0_3 型モデルよりも安定である。しかしながら、実験において析出した Cu_3Si は、 D0_3 型モデルとよく似た立方晶構造を示している。この構造は Si のダイヤモンド構造との整合性が良いため、実際に析出物の構造として観察されたと示唆される。さらに、文献的に最安定構造と考えられる Cu_7Si_2 についても報告する。

