

Si中の銅クラスタの第一原理計算

関西学院大学 東北大金研^A大坪秀礎^A, 山本洋佑, 谷口僚, 西谷滋人, 大野裕^A, 米永一郎^A

First principles calculations of Cu clusters in Si

Kwansei Gakuin Univ., Tohoku Univ.^A, H. Otubo, Y. Yamamoto,R. Taniguchi, S. R. Nishitani, Y. Ohno^A, and I. Yonenaga^A

シリコン(Si)結晶に金属不純物として銅(Cu)が混入したCu-Si系化合物が東北大の大野らによって観察された。観察されたCu析出物は電氣的に不活性なbcc構造であることが確認されている。Si中のCu原子は、孤立状態では電気特性に影響する深い局在準位を形成する。また、Cuシリサイドの析出物も電氣的特性に影響する。従って、本研究ではSi中にCuが析出する原子レベルでの挙動を解明するために、bcc銅シリサイドの析出核における生成エネルギーを求めた。なお、第一原理計算は平面波基底擬ポテンシャル法であるVASPを用いた。

Cuの析出核生成エネルギーを求めるために、Siの原子位置、または原子間位置にCuを配置したモデルを作成した。その作成したモデルのエネルギーをクラスターエネルギーとし、それぞれのクラスターサイズにおける最安定エネルギーと形状を求めた。

図1は偏析極限から測ったクラスターエネルギーのサイズ依存性を示している。また、図2はクラスターサイズが $n=4$ における最安定のクラスター形状で、2つが置換(s)、2つが格子間(i)サイトに入っている。図1に示すように、クラスターのサイズを大きくするにつれて、希薄極限よりエネルギーが下がり、希薄極限との差が大きくなっている。これは、溶質原子が孤立分散している状態よりも、クラスターを形成した方が安定となる事を意味している。発表では、より大きなクラスターのエネルギーおよびエントロピーについて検討した結果を報告する。

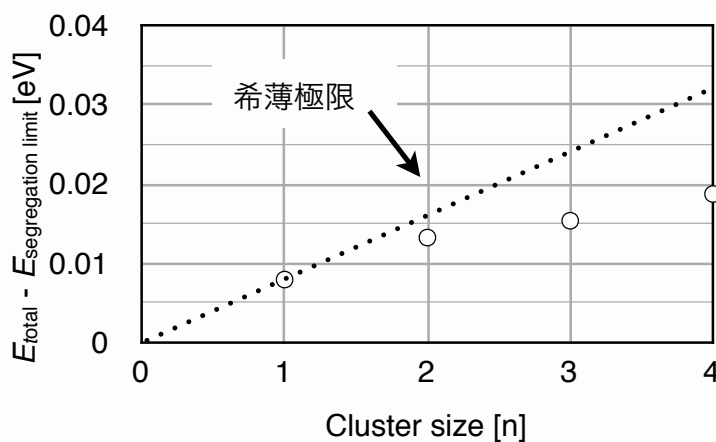


図1. 偏析極限からの差で示した最安定エネルギーのクラスターサイズ依存.

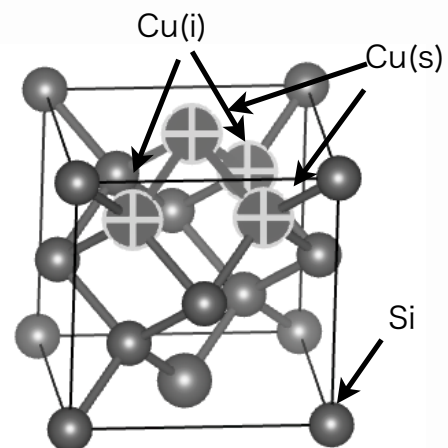


図2. クラスターサイズ $n=4$ におけるクラスターの形状.