

# Si結晶における積層欠陥のドーパント依存性の第一原理計算

関西学院大学理工（院生） ○山本洋佑，西谷滋人，大野裕，徳本有紀，米永一郎

【背景】近年，不純物をドーブしたSi単結晶中の転移芯の分解挙動を，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n型ドーパントのP, Asのドーブ時には，アニーリング温度に応じて積層欠陥エネルギーが低くなり，またドーパントは積層欠陥部に濃化するが，p型ドーパントのBのドーブ時には同様の現象は見られないと報告されている[1]．そこで本研究では第一原理的にSi結晶中の積層欠陥エネルギーのドーパント依存性について調べた．

【手法】第一原理計算にはVASPを用い，擬ポテンシャル法としてPAW近似を用いた．またカットオフエネルギーを350eVに設定した．計算対象として積層欠陥を含んだ16層で構成するSiの結晶モデルを作り，ドーパントを各層に配置してそのエネルギーを調べた．

【結果】図1は第1層から第16層を横軸にとり，1層あたりのGaの濃度が各々100%，25%における計算結果である．積層欠陥はh (hexagonal) と記した9-12層に導入している．縦軸にGaをそれぞれの層で置換したモデル ( $E_{SF-Si(P)}$ ) とSi純結晶のモデル ( $E_{SF-Si}$ ) とのエネルギー差を示している．これによると，p型ドーパントであるGaが積層欠陥部に濃化した場合においても，エネルギーが低下した．またGaの他にp型ドーパントとしてはB，n型ドーパントとしてP, Asについても調べた結果，B以外のAs, Pにおいても積層欠陥部に濃化した方が安定であることがわかった．これはP, Ga, Asのドーパントは積層欠陥部に濃化しやすいことを示唆しており，大野らの実験結果と整合する．

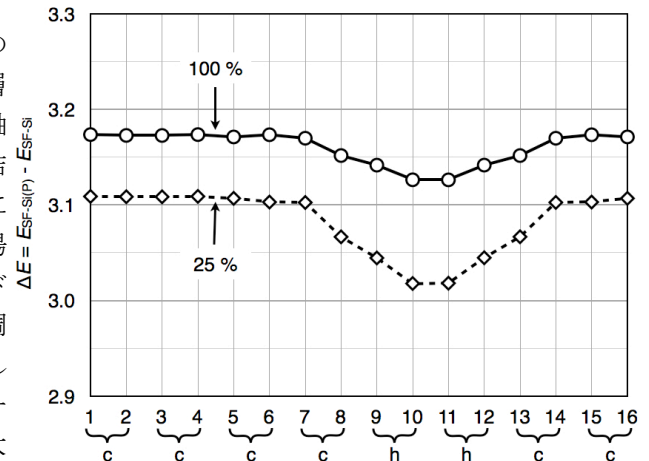


図1 Gaの置換位置によるエネルギー変化.

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