

# Ge 積層欠陥中のドーパントの第一原理計算

関西学院大・理工, 東北大金研<sup>A</sup>

榊原健, 西谷滋人, 中村仁美, 山本洋介, 大野裕<sup>A</sup>, 米永一郎<sup>A</sup>

Electronic structure calculation of dopant around stacking fault in Ge crystal

Department of Informatics, Kwansei Gakuin Univ, <sup>A</sup>Tohoku Univ.,

K. Sakakibara, S. R. Nishitani, H. Nakamura, Y. Yamamoto, Y. Ohno<sup>A</sup> and I. Yonenaga<sup>A</sup>

目的 Siの積層欠陥部に偏析するドーパントの振る舞いに関する新たなモデルを我々のグループは提案している [1]. 従来のモデルでは, 積層欠陥に偏析するドーパントはドナーレベルが変化する n 型のみとされていた. 我々のモデルでは, アクセプターレベルの変化に影響されないとする p 型も価電子帯の低下によって偏析することを示した. このモデルは, 東北大・大野らが得た Si 中の積層欠陥に Ga が偏析する実験結果と整合している [2][3]. この新たに提案されたモデルが, Ge 結晶の積層欠陥でも成立するかを確認するために第一原理計算をおこなった.

方法 第一原理計算には, VASP(Vienna ab initio simulation package) を使用した. 1 層に 4 原子配置した 16 層の Ge 結晶モデルに積層欠陥を導入する. Ga および As を積層欠陥との距離が変わるよう各層に 1 原子置換しエネルギー変化を求めた.

結果 図 1 に Ga, As を置換した結果を示した. 溶解エネルギーを縦軸にとり, 横軸はドーパントを置換した層を示している. 積層欠陥は 10 層と 11 層の間に導入されており, 近づくにつれて溶解エネルギーが低下する. 完全結晶部と積層欠陥部のエネルギー差は, Ga, As それぞれ 0.03eV, 0.05eV であり, p 型, n 型ともに積層欠陥部に偏析することを示している, また, Si 結晶のモデルにおける同様のエネルギー差は Ga, As それぞれ 0.09eV, 0.07eV であり, Si 結晶よりも積層欠陥部に偏析しづらいつという結果を得た.

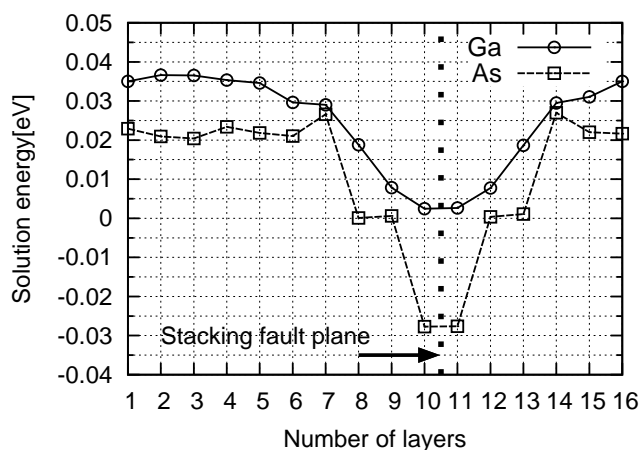


図 1: Ga, As の位置による溶解エネルギーの変化.

- [1] Y. Yamamoto, K. Togase, Y. Ohno, I. Yonenaga, & S. R. Nishitani, J. J. Appl. Phys. 53 (2014) 061302.
- [2] Y. Ohno, T. Shirakawa, T. Taishi, & I. Yonenaga, Appl. Phys. Lett. 95 (2009) 091915.
- [3] Y. Ohno, T. Taishi, Y. Tokumoto, & I. Yonenaga, J. Appl. Phys. 108 (2010) 073514.