

0.1 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

背景 最近, リン (P) をドープした 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 [1]. 図 1 は模式図で示した転位の分解挙動の weak beam 法による電子顕微鏡像, この幅を測定し集計したヒストグラム, および, それから求めた stacking fault energy の dopant 濃度依存性を示している. それによると P の dopant 濃度が増えるにしたがって転位芯の分解幅が増加する, つまり stacking fault energy が減少する傾向を示している. 一方, B を dopant とした場合は, このような依存性は見られない. 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.

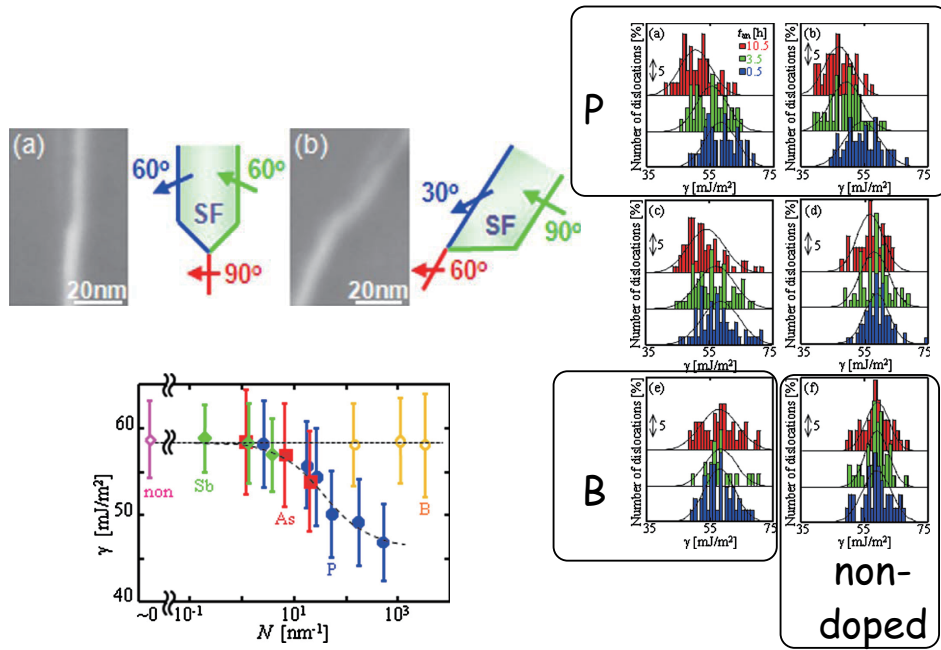


図 1: 模式図で示したような転位の分解挙動の weak beam 法による電子顕微鏡像, この幅を測定し集計したヒストグラム, および, それから求めた stacking fault energy の dopant 濃度依存性.

計算モデル 図 2 の左パネルに示すような積層欠陥を含んだ 16 層で構成する長周期モデルを作った. ダイヤモンド構造の四面体で $2 \times 2 \times 16$ で, No.10site と No.11site の間に四面体構造を崩さない glide-set の stacking fault が入っている. 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 および B を各層に配置してそのエネルギーを調べた.

結果 図 2 の右パネルは第 1 層から第 16 層を横軸にとり, それぞれの stacking の Si1 原子を P に置き換えた場合の計算結果である. 9-12 層は cubic の積層から hexagonal の積層に変化している. 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, 10,11 層の積層欠陥領域に P をおいた場合に, エネルギーは 0.1eV 程度下がっている.

一方 B についても同様の計算を行った. その結果図 3 に示した通り, B が積層欠陥領域に入った場合は, 完全結晶領域にいるよりもエネルギーが高くなる傾向があった. これより, P は積層

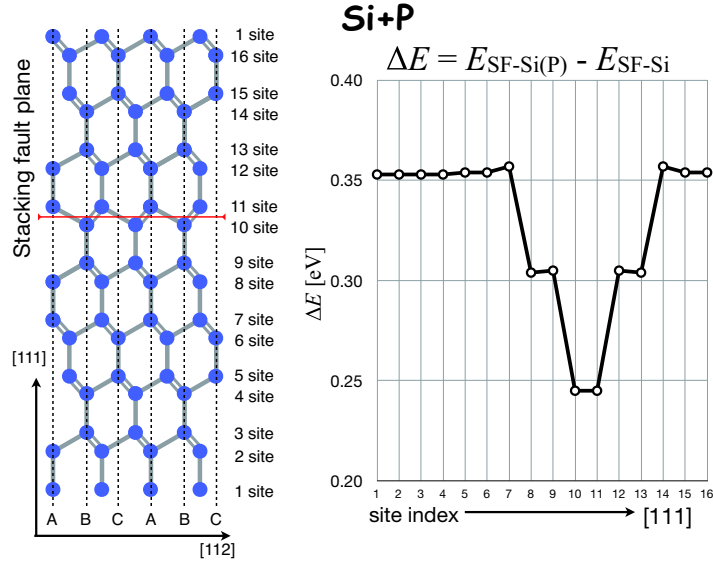


図 2: 原子配置の模式図と、それぞれの層の Si 一原子を P と置換した場合のエネルギー変化.

欠陥領域に濃化する傾向が強く、さらに積層欠陥エネルギーを下げる傾向があることがわかった。一方、B に関してはこのような傾向は見られなかった。これらの結果は、実験結果と整合しており、積層欠陥エネルギーは P が濃化することによって減少し、B の場合は、積層欠陥領域から遠ざかり、エネルギー変化を与えないことが、第一原理計算によって判明した。

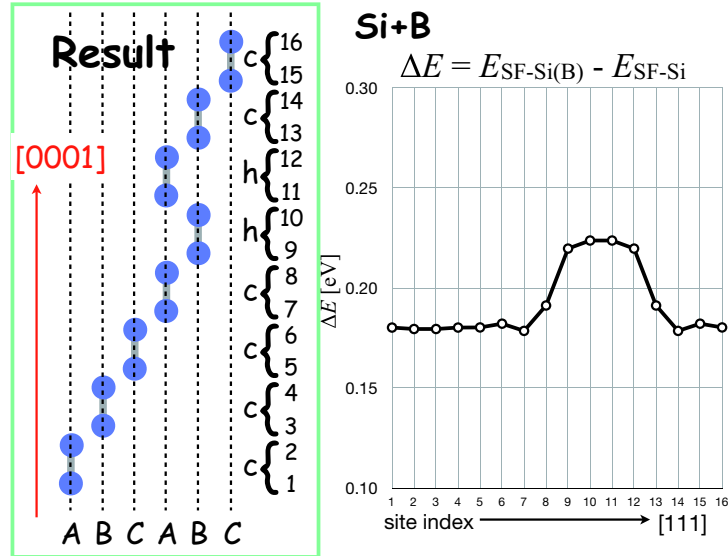


図 3: 原子配置の模式図と、それぞれの層の Si 一原子を B と置換した場合のエネルギー変化.

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