

- ▼ \subsection{Si中の酸素の侵入位置}

- ▼ \subsubsection{序論}

- Cz法において、原料である多結晶Siの融液中に酸素原子が侵入し、種結晶のSi単結晶中でSiOの核を生成する。さらにO原子が凝集することでクラスタ化し、 SiO_2 として析出される。これは金属不純物のゲッターとして有益な役割を果たす一方、自身が結晶欠陥の一種であり、半導体デバイスでの電流漏れ(リーク)の一因を担う。しかしながら、 SiO_2 の析出挙動は未解明である。

本研究では、Cz法で生成される析出核の活性化エネルギーを求めることを最終目的としている。そのため、まずは計算の信頼性の検証として、 SiO_2 多形の相転移時の圧力値を計算で求め、文献値と比較した。次に析出の始状態として、Si完全結晶中に侵入する酸素1原子の安定位置を、VASPを用いた第一原理計算により求めた。

- ▼ \subsubsection{\$\text{SiO}_2\$多形の第一原理計算}

- ▼ \paragraph{\$\text{SiO}_2\$多形}

- 図\ref{polymorphism}は SiO_2 の状態図である。このように SiO_2 は種々の多形をとることが知られている。これらは、一度できてしまうと常温常圧でも安定に存在する。stishoviteを除いた多形においてはシリコンを中心とした SiO_4 四面体を作る。この局所的な相似性にも関わらず、密度では約2倍、体積弾性率は約18倍もの広範囲にも及ぶことが SiO_2 の特徴でもある \cite{1}。また、高温で安定なcristobalite, tridymiteの2つの多形は、急冷却することで低温型として準安定となることが確認されている \cite{2}。

- \begin{figure}[htbp]
 \begin{center}
 \includegraphics[scale=0.5,angle=360]{./Figure/takei.jpg}
 \caption{\$\text{SiO}_2\$多形の状態図。 }
 \label{polymorphism}
 \end{center}
 \end{figure}

- \begin{figure}[htbp]
 \begin{center}
 \includegraphics[scale=0.8,angle=360]{./Figure/SiO_E-Vcurve.jpg}
 \caption{\$\text{SiO}_2\$多形のE-V曲線。 (a) 多形8種のE-V曲線。 (b) stishoviteとcoesite, coesiteとlow quartzの共通接線。 }
 \label{polymorphismEV}
 \end{center}
 \end{figure}

- \\

図 \ref{polymorphismEV} (a) は、VASPを用いて描いた、各 SiO_2 多形の基底状態におけるE-V曲線である。縦軸、横軸はそれぞれ、一原子あたりのエネルギー、体積を表している。この図より高圧で安定なstishovite以外はほぼ同じエネルギーで安定となった。

- ▼ \paragraph{結果の信頼性}

- ここでVASPで求めたエネルギーの信頼性を評価していきたい。まず熱力学の第一法則より、内部エネルギー変化(dE)は、系に取り込まれた熱 δQ から系のした仕事 δW をひいて

- \begin{equation}
dE = \delta Q - \delta W
\end{equation}

- これは可逆な断熱過程では $\delta Q = 0$ および $\delta W_{\text{rev}} = PdV$ であるから

- \begin{equation}
dE = -PdV
\end{equation}

- よって、圧力(P)は

- \begin{equation}
\label{press2}
\end{equation}