

- \subsection{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}

▼ \paragraph{積層欠陥エネルギーの第一原理計算}

- ▶ 欠陥エネルギーの中で第一原理英計算が比較的簡単な2次元欠陥の積層欠陥エネルギーに適用した例を紹介する.

最近, リン(P)をドーブした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\ref{Fig:Ohno-1}は模式図で示した転位の分解挙動のweek 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.

▶ \paragraph{計算モデル}

▶ \paragraph{結果}

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