

コア準位XPSによるSi中のBクラスターの同定：第一原理的研究

Identification of boron clusters in silicon by core-level XPS: a first-principles study

山内淳、吉本芳英、諏訪雄二

J. Yamauchi, Y. Yoshimoto, and Y. Suwa

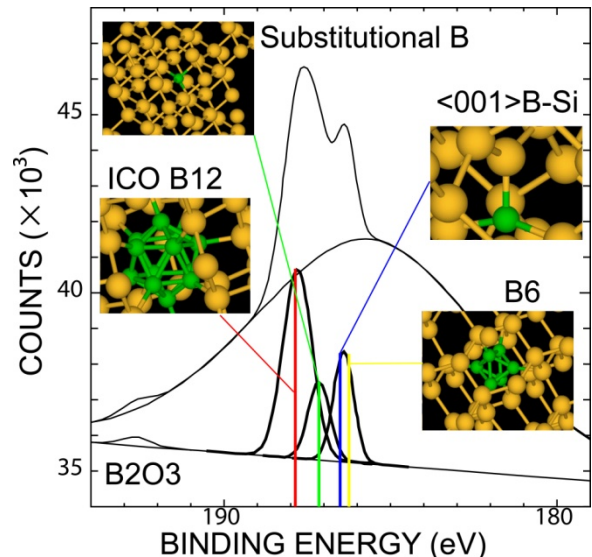
慶應義塾大学理工学部、鳥取大院工学研究科、日立中央研究所

Faculty of Sci. and Tech., Keio University, 3-14-1 Hiysohi, Yokohama 223-8522
 Dept. of Appl. Math. and Phys., Tottori Univ. 4-101 Koyama-Minami, Tottori 680-8552
 Central Research. Laboratory. Hitachi Ltd. Hatoyama, Saitama 350-0395

半導体中の不純物の高濃度での形態（クラスター）を調べることは応用上非常に重要なことである。しかしながら、基板半導体元素に対して、元々多くとも数%程度しか存在しない不純物原子によって形成されるクラスターは更に少なく、これまで種々の観測手段をもってしても検出は難しいものであった。ところが最近、高輝度放射光施設SPRING8を利用して照射光の強度を上げることによってクラスター濃度の低さを補い、ドーパント導入プロセスの違いに依存して生成されるホウ素（B）欠陥のX線光電子分光（XPS）測定が筒井等のグループによって行われた[1][2]。一方で、理論的には半導体中欠陥の定量的に信頼性の高いXPS計算はこれまでのところなされていなかった。この原因は計算の境界条件を十分に評価しなかったためである。

本研究では、screened core-hole 擬ポテンシャル[3]を用いた Δ SCF法によりB1sコア電子のXPS束縛エネルギーを計算し、境界条件を評価して定量的に0.1eVまで収束していることを確認した[4]。この条件を満たすために、512Si原子からなるスーパーセルを採用した。

図中の曲線は、イオン注入によって形成されたBクラスター起因のXPS実験のスペクトル[5]である。縦線は、可能な候補クラスターに対してXPS計算を行った中から同定したクラスターの束縛エネルギーを示している。置換配置(substitutional) Bより大きな束縛エネルギーをもつピークは、八面体B6ではなく、二十面体B12クラスターと同定され、著者の一人（山内）の所属していたグループの実験並びに理論計算とも整合している。また前述の筒井等によるプラズマドーピング法によって導入されたB欠陥についても良好な結果が得られている。



- [1] K. Tsutsui, *et al.*, J. Appl. Phys., **104** 093709 (2008).
- [2] A. Uedono, *et al.* Jpn. J. Appl. Phys. **49** 051301 (2010).
- [3] E. Pehlke and M. Scheffler, Phys. Rev. Lett. **71** 2338 (1993).
- [4] J. Yamauchi, Y. Yoshimoto, and Y. Suwa, Appl. Phys. Lett. **99** 191901 (2011).
- [5] I. Mizushima, *et al.*, Appl. Phys. Lett. **63** 373 (1993).