

半導体中格子欠陥の第一原理XPS計算

First-principles XPS calculations on the defects in semiconductors

山内 淳

Jun Yamauchi

慶應義塾大学理工学部物理学科

Department of Physics, Faculty of Science and Technology, Keio University,
3-14-1 Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama-shi, Kanagawa 223-8582

半導体中の格子欠陥は、ドーパント活性を左右する等重要な役割を果たしているが、原子レベルの構造は未だに解明されていないものも多い。実験的な測定方法としては、最近X線光電子分光(XPS)が高輝度放射光施設などの利用により新たな発展を見せている。一方、理論面では、信頼性のある第一原理XPS計算はほとんど行われてこなかった。この理由は個々の理論モデル間のXPS束縛エネルギーを議論するためにはそれぞれのモデルにおけるエネルギー境界条件を統一しなければならず、この条件を達成するために大きなスーパーセルが必要となるからである。この境界条件を慎重に評価し、Si中のB欠陥については、512Siセルで十分な計算精度が保証されることを示し、実験的に提案されていた二十面体B12クラスターがXPSスペクトルの一つを良く説明し、更に別のピークに対して新たな構造を提案することができた[1,2]。

本研究では、上記のXPS計算の発展として、SiC中のB欠陥並びにSi中のAsのXPS計算結果について報告する。

SiCは多形を生じることが知られており、その中の2種類の多形についてXPSスペクトルを調べた。Si中のBが1eV程度のレンジに収まるのに対して、SiC中のBの場合には数eV程度と広い範囲にわたり、これはSiとCの電気陰性度が大きな元素を含むため、欠陥サイトにより局所ポテンシャルの変動が大きいことによると考えられる。

Si中のAsに関しては、東工大の筒井グループによる実験が知られており、置換配置Asに対して1.2eV浅い束縛エネルギーを生じさせる欠陥構造が示唆されている[3]。この実験を説明する欠陥モデルを、理論的、実験的にAsを含む系で生成しやすいとされる空孔(vacancy)を含む欠陥、置換配置Asを含む欠陥を中心に探索したところ、電氣的に中性な条件下では該当するものが見つからなかった。Asが活性化している可能性を考慮し、フェルミエネルギーが伝導体下端付近にある場合の荷電状態計算を行ったところ、As置換配置と空孔のペア欠陥が該当スペクトルをよく説明することが判明し、実験ピークの原因となる構造の候補と考えられる。

[1] J. Yamauchi, Y. Yoshimoto, Y. Suwa, Appl. Phys. Lett. **99** 191901 (2011).

[2] 山内 淳、固体物理 **48** 215 (2013).

[3] K. Tsutsui, *et al.*, IEEE Proc. Int. Workshop on Junction Technology (IWJT) p.1 (2010).