

Title	シリコン結晶中のn型ドーパント不純物原子の第一原理X線光電子分光計算
Sub Title	First principles X-ray photoelectron spectroscopy calculation of n-type dopants in silicon crystal
Author	山内, 淳(Yamauchi, Jun)
Publisher	慶應義塾大学
Publication year	2018
Jtitle	学事振興資金研究成果実績報告書 (2017.)
JaLC DOI	
Abstract	<p>半導体結晶中における不純物元素の原子形態は基礎科学はもちろん応用面からも重要であり、最近ではSPRing8などの高輝度放射光施設を利用した内殻電子によるX線光電子分光(XPS)の精緻な測定が行われるようになってきた。XPSスペクトルから直接原子構造を決定することができないために、測定結果の解釈には精度の高い理論計算により欠陥モデルとXPS値を対応づける必要があるが、信頼性のある計算はほとんど行われていない。これはモデル計算における境界条件の評価が不十分なことが原因である。本研究では、この点を考慮した高精度な密度汎関数法を基礎とした第一原理計算によりXPS束縛エネルギーを予測し、実験データの精密な解析を行っている。</p> <p>本研究の対象系はシリコン結晶中の砒素と燐である。この2元素はシリコン産業におけるもっとも重要なn型ドーパントとして知られている。モデルセルサイズに対するXPS束縛エネルギーの収束性を詳細に確認して、1000原子相当のモデルセルを採用した。計算では、n型半導体として活性化されたときのフェルミエネルギーの下で実現されうる荷電状態とスピン状態についても検討している。砒素については、原子空孔とその周りのいくつかの最近接置換配置に砒素原子が配置された欠陥構造が、実験値のピーク構造をよく説明することが示された。これらの中でも特に負に帯電した空孔と一つの置換配置砒素原子の組み合わせが、形成エネルギー、混合エントロピーを考慮すると有望と考えられる。シリコン中の燐を含む欠陥についても、砒素の場合と似た結果が得られているが、この場合には2個の燐原子からなる欠陥など、空孔を含まない、いくつかの欠陥についても、空孔を含む欠陥と近いピークを生じる結果が得られた。</p> <p>It is important to determine atomic structures of impurity defects in semiconductors from scientific as well as technological view points. Recently, powerful synchrotron radiation facilities like SPRing8 have enabled the X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) measurements for atomic structure determination in high accuracy. Since there is no one-to-one correspondence between XPS spectra and atomic structures, highly accurate theoretical analysis is required to interpret experimental results. There are, however, few reliable calculations. This is mainly due to the difficult evaluation of model boundaries. In this study, we carefully evaluate the boundary condition and obtain reliable XPS values using the density functional theory.</p> <p>We investigated the X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) binding and formation energies of arsenic and phosphorous defects in silicon crystal using a first-principles calculation. Arsenic and phosphorous are the most important n-type dopant elements in silicon industries.</p> <p>The convergence of the XPS binding energy is carefully checked and we adopted the cubic supercell corresponding to 1000 Si atoms.</p> <p>The charged states possible in n-type condition and spin states are also considered. In terms of arsenic, the models, which are comprised of one vacancy and a few nearest neighbor substitutional arsenic atoms, explain the experimental XPS binding energy peaks. Among the models, considering the number of included arsenic atoms, the negatively ionized defect of vacancy and one arsenic atom is probable to explain the experimental peak. In the case of phosphorus defects in silicon, the similar results are obtained except for the point that a few defect models without vacancies reveal the XPS binding energy close to the defects including a vacancy.</p>
Notes	
Genre	Research Paper
URL	https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=2017000001-20170113

慶應義塾大学学術情報リポジトリ(KOARA)に掲載されているコンテンツの著作権は、それぞれの著作者、学会または出版社/発行者に帰属し、その権利は著作権法によって保護されています。引用にあたっては、著作権法を遵守してご利用ください。

The copyrights of content available on the Keio Associated Repository of Academic resources (KOARA) belong to the respective authors, academic societies, or publishers/issuers, and these rights are protected by the Japanese Copyright Act. When quoting the content, please follow the Japanese copyright act.

研究代表者	所属	理工学部	職名	准教授	補助額	300 (A) 千円
	氏名	山内 淳	氏名 (英語)	Jun Yamauchi		
研究課題 (日本語)						
シリコン結晶中の n 型ドーパント不純物原子の第一原理 X 線光電子分光計算						
研究課題 (英訳)						
First principles X-ray photoelectron spectroscopy calculation of n-type dopants in silicon crystal						
1. 研究成果実績の概要						
<p>半導体結晶中における不純物元素の原子形態は基礎科学はもちろん応用面からも重要であり、最近では SPring8 などの高輝度放射光施設を利用した内殻電子による X 線光電子分光(XPS)の精緻な測定が行われるようになってきた。XPS スペクトルから直接原子構造を決定することができないために、測定結果の解釈には精度の高い理論計算により欠陥モデルと XPS 値を対応づける必要があるが、信頼性のある計算はほとんど行われていない。これはモデル計算における境界条件の評価が不十分なことが原因である。本研究では、この点を考慮した高精度な密度汎関数法を基礎とした第一原理計算により XPS 束縛エネルギーを予測し、実験データの精密な解析を行っている。</p> <p>本研究の対象系はシリコン結晶中の砒素と燐である。この 2 元素はシリコン産業におけるもっとも重要な n 型ドーパントとして知られている。モデルセルサイズに対する XPS 束縛エネルギーの収束性を詳細に確認して、1000 原子相当のモデルセルを採用した。計算では、n 型半導体として活性化されたときのフェルミエネルギーの下で実現される荷電状態とスピン状態についても検討している。砒素については、原子空孔とその回りのいくつかの最近接置換配置に砒素原子が配置された欠陥構造が、実験値のピーク構造をよく説明することが示された。これらの中でも特に負に帯電した空孔と一つの置換配置砒素原子の組み合わせが、形成エネルギー、混合エントロピーを考慮すると有望と考えられる。シリコン中の燐を含む欠陥についても、砒素の場合と似た結果が得られているが、この場合には2個の燐原子からなる欠陥など、空孔を含まない、いくつかの欠陥についても、空孔を含む欠陥と近いピークを生じる結果が得られた。</p>						
2. 研究成果実績の概要 (英訳)						
<p>It is important to determine atomic structures of impurity defects in semiconductors from scientific as well as technological view points. Recently, powerful synchrotron radiation facilities like SPring8 have enabled the X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) measurements for atomic structure determination in high accuracy. Since there is no one-to-one correspondence between XPS spectra and atomic structures, highly accurate theoretical analysis is required to interpret experimental results. There are, however, few reliable calculations. This is mainly due to the difficult evaluation of model boundaries. In this study, we carefully evaluate the boundary condition and obtain reliable XPS values using the density functional theory.</p> <p>We investigated the X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) binding and formation energies of arsenic and phosphorous defects in silicon crystal using a first-principles calculation. Arsenic and phosphorous are the most important n-type dopant elements in silicon industries.</p> <p>The convergence of the XPS binding energy is carefully checked and we adopted the cubic supercell corresponding to 1000 Si atoms. The charged states possible in n-type condition and spin states are also considered. In terms of arsenic, the models, which are comprised of one vacancy and a few nearest neighbor substitutional arsenic atoms, explain the experimental XPS binding energy peaks. Among the models, considering the number of included arsenic atoms, the negatively ionized defect of vacancy and one arsenic atom is probable to explain the experimental peak. In the case of phosphorus defects in silicon, the similar results are obtained except for the point that a few defect models without vacancies reveal the XPS binding energy close to the defects including a vacancy.</p>						
3. 本研究課題に関する発表						
発表者氏名 (著者・講演者)	発表課題名 (著書名・演題)	発表学術誌名 (著書発行所・講演学会)	学術誌発行年月 (著書発行年月・講演年月)			
Jun Yamauchi	First-principles X-ray photoelectron spectroscopy analysis of arsenic and phosphorus defects in silicon crystal	29th International Conference on Defects in Semiconductors	2017 August			