

## これまでの常識を覆す Si 結晶中の微量 As 周辺の特異な原子配列

林 好一、米永一郎、細川伸也<sup>1</sup>、八方直久<sup>2</sup>

東北大学金属材料研究所、1 広島工業大学、2 広島市立大学

単結晶中に様々な不純物を添加することによる物性の制御は、従来より培われてきた半導体分野のキーとなる技術である。特に、As を添加した Si は N 型半導体として代表的な物質であり、固体物理や電子材料のテキストなどの多くは、これを用いて半導体物性の説明がなされている。説明に用いられる図には、通常、添加元素が Si 原子に置換したモデル(例えば、Kittel の固体物理の教科書など)が用いられ、4 配位構造を持つことが定説であるかのように取り扱われてきた経緯がある。

これら不純物周辺の局所構造は、EXAFS による評価がこれまでに多数行われてきた。この中で As-Si 間の原子間距離は Ga-Si や Ge-Si などの周辺他元素のものに比べて、0.1Å 程長いという異常な特徴が報告されている。<sup>1,2)</sup> この実験結果は Pauling 則に基づく 2 原子間結合距離では説明できない。また、4 配位構造が常識とされるためか、大きく原子配列を変えた解析も行われてはいない。我々はこの点を解明すべく、蛍光 X 線ホログラフィーを用いて、Si 単結晶中の As(チョクラルスキー法で作製)の周りの三次元原子像の再生を行った。As の濃度は、 $4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  である。ホログラムより再生された原子像から、As 周辺の局所構造は、従来のダイヤモンド構造の中心 Si 原子を As で置換した 4 配位モデルと大きく異なり、6 配位構造を基本としていることが分かった。一方、論文 1,2) に用いられた試料は、イオンインプラネーションによって As をドーブした試料であり、濃度も異なるために環境構造が異なっている可能性があった。その点を確認するために、XAFS のビームラインとして確立された BL12C において実験を行った。

試料には、 $4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  及び  $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  の濃度の Si:As(チョクラルスキー法)を用い、蛍光法にて EXAFS 測定を行った。図に示す両 EXAFS スペクトルは、ほとんど違いがなく、文献 1,2) のものとも極めて似ていた。このため、イオンインプラネーションで作製された試料と、チョクラルスキー法で作製された試料の、As 周辺の局所構造がほぼ同一と見なせることが分かり、この結果は Si:As 結晶中のまわりの原子配列について従来の原子配列モデルを変えた解析を早急に行う必要があることを示している。

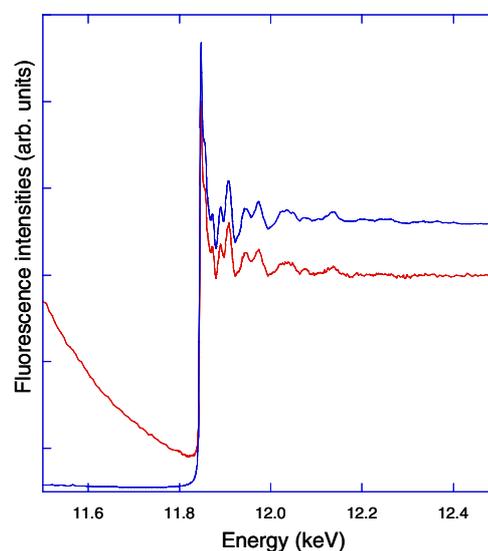


図  $4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ (青線)及び  $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (赤線)の濃度の Si:As の As K EXAFS

- 1) A. Erbil, W. Weber, G. S. Cargill III and R. F. Boehme, Phys. Rev. B 34, 1392 (1986).
- 2) S. Wei, H. Oyanagi, H. Kawatani and K. Sakamoto, J. Appl. Phys. 82, 4810 (1997).