

Oral presentation | 15 Crystal Engineering : 15.7 Crystal characterization, impurities and crystal defects

📅 Tue. Sep 17, 2024 9:00 AM - 11:30 AM JST | Tue. Sep 17, 2024 12:00 AM - 2:30 AM UTC 🏛️ B2
(Exhibition Hall B)

[17a-B2-1~9] 15.7 Crystal characterization, impurities and crystal defects

Hidetoshi Suzuki(Miyazaki Univ.), Haruo Sudo(GlobalWafers)

9:00 AM - 9:15 AM JST | 12:00 AM - 12:15 AM UTC

[17a-B2-1]

Analysis of an oblique threading edge dislocation in 4H-SiC epilayer.

○Chiharu Ota¹, Nishio Johji¹, Kushibe Mitsuhiro¹, Ryosuke Iijima¹ (1.R&D Center, Toshiba)

◆ English Presentation

9:15 AM - 9:30 AM JST | 12:15 AM - 12:30 AM UTC

[17a-B2-2]

Enhanced Hole Conductivity in Magnesium-Intercalated GaN Superlattice Probed by Terahertz Time-Domain Ellipsometry

○Verdad Agulto¹, Toshiyuki Iwamoto^{1,2}, Kosaku Kato¹, Jia Wang³, Hiroshi Amano³, Makoto Nakajima¹ (1.Osaka Univ., 2.Nippo Precision Co., Ltd., 3.Nagoya Univ.)

9:30 AM - 9:45 AM JST | 12:30 AM - 12:45 AM UTC

[17a-B2-3]

The effect of transparency of a crystal and the melt on twisting during CZ-Ga₂O₃ growth

○Koichi Kakimoto¹, Taketoshi Tomida², Vladimir Kochurikhin², Kei Kamada¹, Satoshi Nakano³, Akira Yoshikawa⁴ (1.NICHE, Tohoku Univ., 2.C & A co., 3.RIAM, Kyushu Univ., 4.IMR, Tohoku Univ.)

9:45 AM - 10:00 AM JST | 12:45 AM - 1:00 AM UTC

[17a-B2-4]

Feature analysis of stable atomic configuration in SiGe alloys by theoretical simulation

○(M2)Hibiki Bekku¹, Yusuke Noda³, Koji Sueoka² (1.Grad. Sch. Compt. Sci. Syst. Eng., Okayama Pref. Univ., 2.Fac. Compt. Sci. Syst. Eng., Okayama Pref. Univ., 3.Kyushu Inst. Technol.)

10:00 AM - 10:15 AM JST | 1:00 AM - 1:15 AM UTC

[17a-B2-5]

Demonstration for transition selective photoluminescence

○Shinichirou Gozu¹ (1.AIST)

◆ Presentation by Applicant for JSAP Young Scientists Presentation Award

10:15 AM - 10:30 AM JST | 1:15 AM - 1:30 AM UTC

[17a-B2-6]

Lattice constants and bandgap energies of all-inorganic metal halide perovskite-type semiconductor alloy CsSn_xPb_{1-x}Br₃

○Reo Asahara¹, Masahiro Abe², Akiko Hori², Masato Sotome³, Takashi Kondo^{1,3} (1.Tokyo Univ., 2.Shibaura Univ., 3.RCAST, Tokyo Univ.)

10:45 AM - 11:00 AM JST | 1:45 AM - 2:00 AM UTC

[17a-B2-7]

Fe gettering behavior of SiH_x and C₂H_y mixture molecular-ion-implanted silicon epitaxial wafer (2)

○Ryo Hirose¹, Ayumi Masada¹, Takeshi Kadono¹, Koji Kobayashi¹, Akihiro Suzuki¹, Sho Nagatomo¹, Kazunari Kurita¹ (1.SUMCO CORPORATION)

11:00 AM - 11:15 AM JST | 2:00 AM - 2:15 AM UTC

[17a-B2-8]

Effect of Annealing Temperature after Electron Irradiation on Radiative Recombination of Defect Levels in Si

○Yuto Haraguchi¹, Takahiro Iwakiri¹, Tomoki Harada¹, Tetsuo Ikari¹, Atsuhiko Fukuyama¹, Shun Sasaki², Noritomo Mitsugi² (1.Univ. of Miyazaki, 2.SUMCO Corporation)

11:15 AM - 11:30 AM JST | 2:15 AM - 2:30 AM UTC

[17a-B2-9]

Prediction of crystal defect generation by machine learning considering crystal orientation distribution

○(M2)Kazuma Torii¹, Kyoka Hara¹, Kentaro Kutsukake^{1,2,3}, Hiroaki Kudo⁴, Ryoji Katsube¹, Noritaka Usami^{1,2,5} (1.Grad. Eng. Nagoya Univ., 2.IMaSS, 3.AIP RIKEN, 4.Grad. Info. Nagoya Univ., 5.InFus)

4H-SiC エピタキシャル成長層に存在する傾斜 TED の解析

Analysis of an oblique threading edge dislocation in 4H-SiC epilayer.

(株)東芝 研究開発センター °太田 千春, 西尾 譲司, 櫛部光弘, 飯島 良介

Corporate R&D Center, Toshiba Corp.,

°Chiharu Ota, Johji Nishio, Mitsuhiro Kushibe, and Ryosuke Iijima

E-mail: chiharu.ota@toshiba.co.jp

【はじめに】4H-SiC には複数の貫通欠陥が存在し、代表的なものは貫通螺旋転位(TSD)、貫通刃状転位(TED)、貫通混合転位(TMD)である。TED は $\mathbf{b} = 1/3\langle 11\bar{2}0 \rangle$ のバーガーズベクトルをもち、同じバーガーズベクトルをもつ基底面転位(BPD)と相互変換する。また、TED の代表的な伝播方向は $[0001]$ 方向であるものの、 $[0001]$ 方向より 15° 前後の傾斜の存在が認められている[1]。今回、 $[0001]$ 方向より大きく傾斜した TED を確認したため[2]、その転位の構造を詳細に解析した。

【実験方法】4H-SiC エピタキシャル成長層中で、BPD へ変換が起こった傾斜 TED を評価対象とした。事前の平面および断面透過型電子顕微鏡(TEM)像から、この傾斜 TED の向きは、 $[0001]$ 方向から $[11\bar{2}0]$ 方向へ約 65° 傾斜した向きであることが分かっている。このサンプルを高倍率で平面 TEM 観察することにより、傾斜貫通転位の構造解析を行った。

【結果】Fig. 1 に平面 TEM 観察像を示す。Fig. 1(b)より、傾斜 TED は完全転位ではなく、2 本の部分転位から構成されていることが分かる。2 本の部分転位間距離は最小で 5-6 nm、最大で 10 数 nm 程度であり、数 10 nm 程度と認識されている BPD の部分転位間距離に比べると小さい値であった。また、事前の断面 TEM 結果から、傾斜角度が安定して 65° 程度である Fig.1(b)左側の領域では、部分転位間距離が相対的に狭く、約 5-6 nm 程度であることが分かった。これらの結果から、 $(\bar{1}100)$ 方向の断面において、 $[0001]$ 方向から 65° の角度で部分転位が基板側から表面側に伝播したと考えると、この伝播した面は $(11\bar{2}14)$ 面であると算出された。(Fig. 2) これまで TED は c 軸 $[0001]$ 方向の完全転位、BPD は基底面上のショックレー型部分転位対と定義されていたが、定義から外れる転位構造の存在が明らかになった。

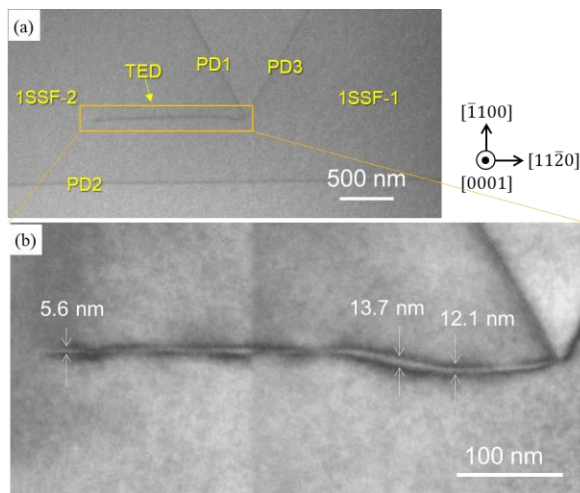


Fig. 1. Plan-view TEM image of the oblique threading dislocation
(a) BF image and (b) enlarged image.

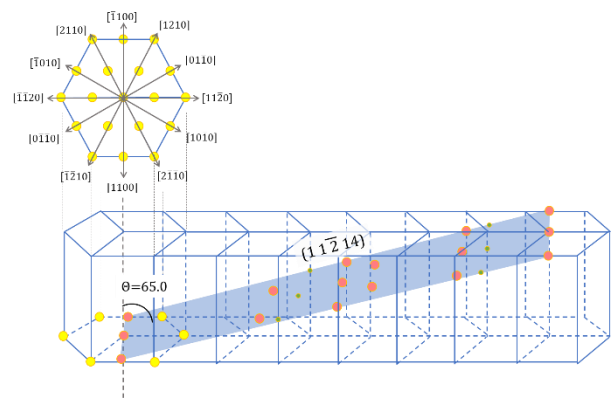


Fig. 2. The $(11\bar{2}14)$ plane with the oblique threading dislocation.

[1] M. Nagano et al., Japanese Journal of Applied Physics 52 04CP09 (2013)

[2] 太田、西尾、飯島 第 71 回応用物理学会春季学術講演会 22p-P05-3 (2024)

Enhanced Hole Conductivity in Magnesium-Intercalated GaN Superlattice Probed by Terahertz Time-Domain Ellipsometry

Osaka Univ.¹, Nippo Precision Co., Ltd.², Nagoya Univ.³, °Verdad C. Agulto¹, Toshiyuki

Iwamoto^{1,2}, Kosaku Kato¹, Jia Wang³, Hiroshi Amano³, Makoto Nakajima¹

E-mail: verdad.agulto.ile@osaka-u.ac.jp

Interstitial intercalation of two-dimensional (2D) Mg into a bulk GaN lattice has recently been demonstrated by annealing a metallic Mg film on GaN at atmospheric pressure [1]. This Mg-intercalated GaN superlattice (MiGS) structure significantly enhances conductivity along the out-of-plane direction (*c*-axis) due to the compressive strain from intercalation. However, the van der Pauw method is inadequate for detecting this enhancement as it only measures in-plane resistivity. Here we demonstrate the use of terahertz time-domain ellipsometry (THz-TDE) to probe the effective conductivity of p-type GaN, including the contributions from both in-plane and out-of-plane directions. THz spectroscopy techniques, such as THz-TDE, are nondestructive, contact-free methods to characterize carrier transport properties in semiconductors [2,3]. THz-TDE measures the change in polarization of THz waves reflected from the sample at oblique incidence. From these measurements, the sample's relative permittivity and, consequently, its conductivity properties are determined.

Figure 1a shows the THz complex conductivity spectra obtained from THz-TDE measurements of p-type GaN with and without the MiGS structure (see Fig. 1b for the sample schematic). For the p-type GaN sample with MiGS, the measured optical response reflects the effective conductivity of the combined p-type GaN and MiGS phase. The spectra were fitted to the Drude model, where the real part of the conductivity extrapolated to zero frequency corresponds to the DC conductivity, and the crossover frequency of the real and imaginary parts relates to the scattering time. The crossover frequency is found to be similar for both samples, at around 1.2 THz, corresponding to a scattering time of about 0.13 ps. On the other hand, the p-type GaN without MiGS has a DC conductivity of 61.2 S/m, while the p-type GaN with MiGS exhibits a significantly increased conductivity of 379 S/m. This measured conductivity is considered an average for the in-plane and out-of-plane directions. Note that both p-type GaN layers were fabricated with the same initial Mg doping concentration of $7 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ [1]. Hall-effect measurements later revealed hole concentrations of

$1.63 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (without MiGS) and $3.03 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (with MiGS). The slightly increased hole density (almost 2×) cannot fully account for the observed conductivity enhancement (~6×) in the p-type GaN with MiGS. The significantly increased conductivity, yet almost unchanged scattering time, strongly indicates a higher mobility (approximately 3× average increase) due to a potentially reduced effective mass. Uniaxial compression of GaN modifies the band structure, reordering the valence bands, which reduces the effective mass of holes along the *c*-axis. As a result, the hole mobility is improved owing to the dominance of split-off hole bands and the small effective mass of split-off holes along the *c*-direction [1]. The THz-TDE findings provide indirect evidence of the enhanced out-of-plane mobility in p-type GaN with the MiGS structure. Improvements to the current THz-TDE capabilities are underway, allowing for the separate evaluation of the in-plane and out-of-plane properties.

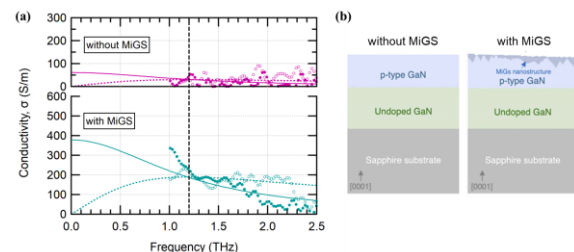


Fig. 1. (a) Complex conductivity spectra of p-type GaN with and without MiGS, fitted to the Drude model, showing the real part (solid circles, solid curves) and the imaginary part (hollow circles, dashed curves). The vertical dashed line indicates the crossover frequency where the real and imaginary parts intersect. **(b)** Schematic drawings of the samples with and without MiGS.

Acknowledgements

This work was partly supported by JST ASPIRE program, grant JPMJAP2311. This work was also partly supported by JKA and its promotion funds from AUTORACE.

References

- [1] J. Wang et al., *Nature* (2024).
<https://doi.org/10.1038/s41586-024-07513-x>
- [2] V. C. Agulto et al., *Sci. Rep.* **11**, 18129 (2021).
- [3] V. C. Agulto et al., *Appl. Phys. Lett.* **118**, 042101 (2021).

CZ-Ga₂O₃ 単結晶成長時における結晶と融液の透明度と結晶ねじれの関係

The effect of transparency of a crystal and the melt on twisting

during CZ-Ga₂O₃ growth東北大 NICHe¹, (株)C&A², 九大応力研³, 東北大金研⁴○柿本 浩一¹, 富田 健稔², Vladimir V. Kochurikhin², 鎌田 圭^{1,2}, 中野 智³, 吉川 彰^{1,2,4}NICHe, Tohoku Univ.¹, C&A Co.², RIAM, Kyushu Univ.³, IMR, Tohoku Univ.⁴○Koichi Kakimoto¹, Taketoshi Tomida², Vladimir V. Kochurikhin², Kei Kamada^{1,2}, Satoshi Nakano³,Akira Yoshikawa^{1,2,4}

E-mail: koichi.kakimoto.a4@tohoku.ac.jp

【はじめに】 Ga₂O₃ 酸化物単結晶は、パワーデバイス用結晶の候補の一つとして注目を浴びている。また、Ga₂O₃ に限らずチョクラルスキー法を用いた酸化物単結晶育成中に、結晶のねじれが問題となっている[1]。本報告では、チョクラルスキー法を用いた Ga₂O₃ 単結晶成長中の結晶育成炉内の3次元温度、流動解析を行った。特に、結晶と融液中の内部輻射が温度分布に与える効果について解析を行った。

【解析手法】本計算では、独自に開発した計算コードを用いて Ga₂O₃ 単結晶成長中の温度速度分布と固液界面形状を解析した。内部輻射の解析には、Rosseland 近似を用いた[2]。

【結果】Fig. 1 (a)と(b)は、それぞれ結晶と融液が不透明と透明時の3次元温度分布を示す。これにより、結晶が透明の場合は、結晶上部の温度が不透明の場合に比べて高いことがわかる。さらに、結晶上部においては両者とも熱伝導度の非対称性に基づく温度分布も確認できる。また、計算結果より、結晶の透明性が融液の透明性よりも、融液温度分布に対して大きな影響を持つことが分かっており、結晶の透明性が結晶のねじれの一つの原因となることがわかる。

参考文献： [1] K. Kamada, et al., J. Cryst. Growth 352 (2012) 91-94.

[2] K. Kakimoto et al., J. Cryst. Growth 640 (2024) 127724

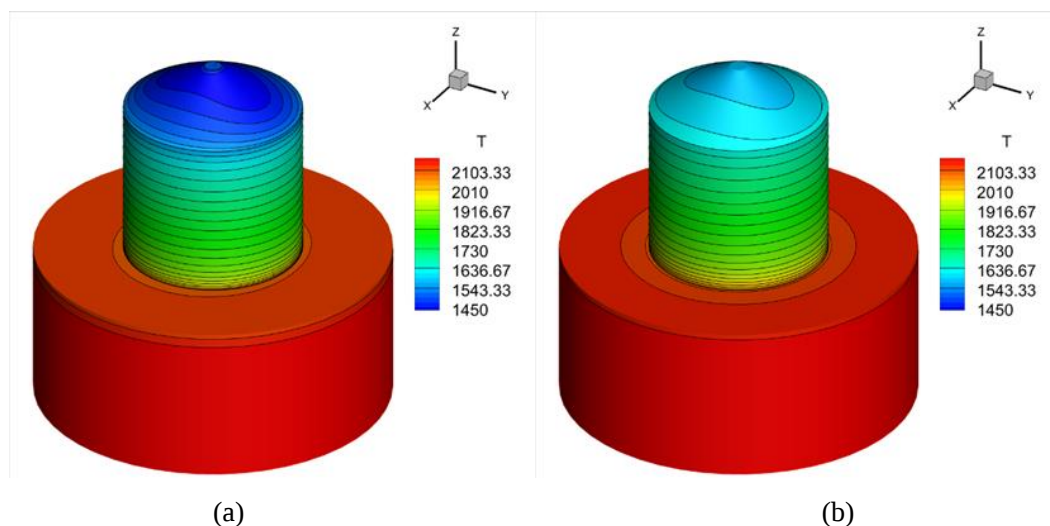


Fig. 1 Temperature distributions in the transparent (a) and opaque (b) crystal and the melt.

謝辞：この成果は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の助成事業(JPNP21005)の結果得られたものである。

理論計算による SiGe 混晶の安定原子配置の特徴分析

Feature analysis of stable atomic configuration in SiGe alloys by theoretical simulation

岡山県大院情報系工¹, 九工大院情報工², 岡山県大情報工³,

○(M2) 別宮 響¹, 野田 祐輔², 末岡 浩治³

Grad. Sch. Comput. Sci. Syst. Eng., Okayama Pref. Univ.¹, Kyushu Inst. Technol.²,

Fac. Comput. Sci. Syst. Eng., Okayama Pref. Univ.³,

○H. Bekku¹, Y. Noda², K. Sueoka³

E-mail: h.bekku1@gmail.com

近年、密度汎関数理論 (DFT) に基づく第一原理計算を用いた半導体材料の解析は広く行われているが、IV族混晶系を対象とした計算の報告は少ない。更に、SiGe 混晶を対象とした計算では、計算に用いる結晶構造モデルの妥当性がほとんど議論されていない[1,2]。我々の先行研究では、64 原子モデルの $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ ($x=0.125\sim0.875$) に対して第一原理計算と遺伝的アルゴリズム (GA) を実行し、各組成における安定原子配置を求めた。特に $x=0.5$ の組成では、既知構造である Zincblende 型よりもエネルギー的に安定な原子配置を発見することに成功した[3]。

本研究では、探索数を前回より増やした GA のシミュレーションを実行し、新たに発見した安定原子配置の物性値を分析した。探索した全ての構造について、ボルツマン分布による各元素の配位数の統計平均を算出し、SiGe 混晶の安定原子配置の特徴を分析した。配位数の統計平均の計算結果から、SiGe 混晶中の原子は同じ元素同士で結合した方がエネルギー的に安定であることが明らかになった。計算結果の詳細は当日報告する。

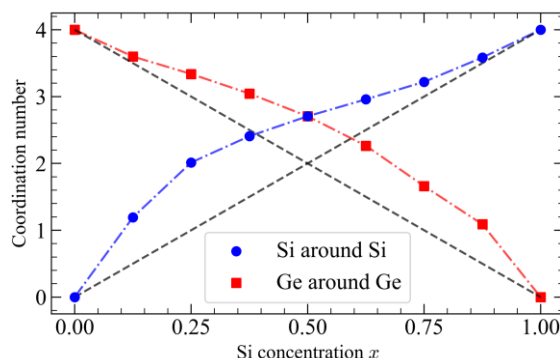


Fig. 1 The expected values of the coordination number of $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ with respect to x

参考文献

- [1] M. H. F. Sluiter and Y. Kawazoe, *Mater. Trans.* **42**, 2201-2205 (2001).
- [2] J. Anavisha et al., *AIP Conf. Proc.* **2708**, 020006 (2022).
- [3] 別宮 他, 第 84 回応用物理学会秋季学術講演会, 23p-A602-13, 熊本, 2023 年 9 月.

謝辞

本研究は、JST-CREST「情報担体を活用した集積デバイス・システム」(研究課題:狭ギャップ IV 族混晶による赤外多帯域受発光集積デバイス, JPMJCR21C2)における成果である。

遷移選択フォトルミネッセンス測定の実証

Demonstration for transition selective photoluminescence

産業技術総合研究所¹ ○牛頭 信一郎¹AIST¹, °Shin-ichiro Gozu¹

E-mail: s-gozu@aist.go.jp

半導体フォトルミネッセンス (PL) 測定は、簡便かつ得られる情報の多さから活用されている。PL スペクトルは一般に複数の遷移からの発光が含まれ重なっている。そこでフィッティングによるピーク分離が行われ、ピーク (遷移) の数を増やせば実験と一致しやすくなるが、解釈が難しくなる。一方、遷移の性質によって、ライフタイム (τ) が決まる。この τ の違いを利用して複数分子からの蛍光を識別する方法が開発されている^[1]。この識別には 1. 励起レーザーを周期的に変調しその周波数を変化させ、2. 位相感応検出器 (例えばロックインアンプ) による選択的な蛍光検出、によって行われる。図 1 は速度の異なる遷移の励起レーザーからの蛍光応答の模式図である。この図の通り、遅い遷移は励起に追従できず、交流振幅(A)、位相(Φ)が変化していく。そこで、検出位相角度 (θ) を変化させながら分光することで、遷移を識別できる。そこで、本研究ではこの手法を利用して半導体からの PL の遷移選択を目指した。測定したサンプルはバルク InAs である。PL 測定系は FTIR をベースに構成した^[2]。図 2 は変調無し (DC) と 100kHz で変調した励起レーザーからの θ 依存 PL 測定結果である。図内矢印は不純物準位エネルギーから計算される発光位置である。この図の通り、 θ に応じてピークに変化が見え、それぞれの角度で 1 つの遷移の検出角がほぼ 90° になり見えなくなっている。バルク半導体からの PL はバンド間

(BtoB) やドナー / アクセプターバンド間 (D_0B, BA_0) 等からの発光が見られ、そのエネルギーが近い位置にあるため分離が難しい。本測定では θ に応じて遷移選択が出来ているため識別が容易になっており、このサンプルの PL は 3 つの遷移含まれていると考えられる。

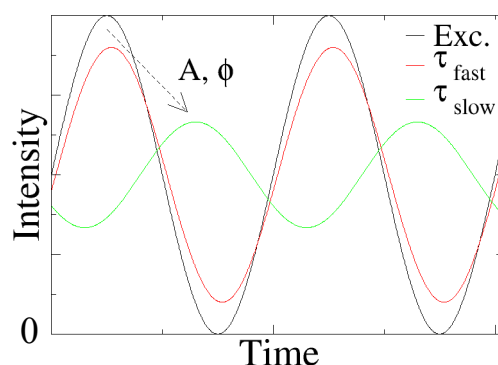
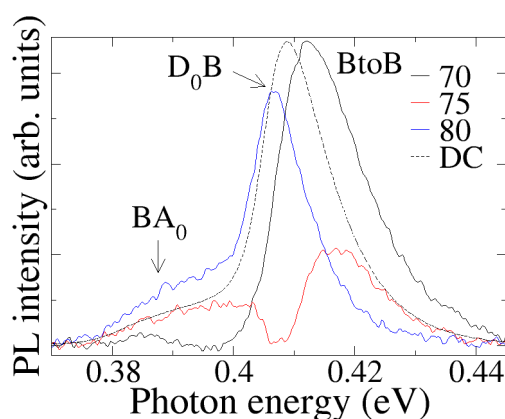


図 1 ハーモニック励起とその応答

図 2 検出角度 (θ) 依存 PL スペクトル

[1] D. M. Jameson *et. al.*, Appl. Spectrosc. Rev., 20, 55(1984). [2] 牛頭, 第 84 回応用物理秋季学術講演会, 21p-P05-6

全無機ペロブスカイト型半導体混晶 $\text{CsSn}_x\text{Pb}_{1-x}\text{Br}_3$ の 格子定数とバンドギャップの組成依存性

Lattice constants and bandgap energies of all-inorganic metal halide perovskite-type
semiconductor alloy $\text{CsSn}_x\text{Pb}_{1-x}\text{Br}_3$

○浅原礼旺¹, 阿部将大², 堀顕子², 五月女真人³, 近藤高志^{1,3}

(東大工¹, 芝浦工大², 東大先端研³)

○Reo Asahara¹, Masahiro Abe², Akiko Hori², Masato Sotome³, Takashi Kondo^{1,3}

(School of Eng., Univ. of Tokyo¹, Shibaura Inst. Tech.², RCAST, Univ. of Tokyo³)

E-mail: asahara@castle.t.u-tokyo.ac.jp

ハロゲン化金属ペロブスカイト(化学組成: ABX_3)は、多くがキャリア寿命の長い直接遷移型半導体であり太陽電池などへの応用が期待されている。各サイトのイオン ($\text{A} = \text{Cs}^+$, CH_3NH_3^+ , $\text{HC}(\text{NH}_2)_2^+$ など, $\text{B} = \text{Pb}^{2+}$, Sn^{2+} など, $\text{X} = \text{Cl}$, Br , I) を様々な比で置換することで安定な混晶を作製でき、格子定数(a)やバンドギャップエネルギー(E_g)のチューニングが可能である[1]。中でも、無機イオンのみで構成される熱的安定性の高い全無機ペロブスカイト混晶 $\text{CsSn}_x\text{Pb}_{1-x}\text{Br}_3$ ($0 \leq x \leq 1$) は、 $E_g = 1.7 \sim 2.3$ eV であるため、シリコンタンデム太陽電池に適しており最近注目されている[2]。しかし、本混晶系については a の報告値はばらついており、 E_g についても励起子吸収ピークの分離評価がされていなかった[1, 2, 3]。そこで本研究では、 $a(x)$, $E_g(x)$ を高い精度が期待される単結晶 XRD と蒸着薄膜の光吸収スペクトルによって評価した。

HBr 水溶液と H_3PO_2 水溶液の混酸に CsBr 粉末(1 mmol)および $\text{PbBr}_2 + \text{SnBr}_2$ 粉末(計 1 mmol)を溶解させ、 140°C までの昇温後 1°C/h で徐冷する水熱合成法で単結晶試料を作製した。得られた単結晶を乾燥窒素フローで温度を 300 K に保ちながら単結晶 XRD 解析を行うことで a を評価した(図 1a)。得られた $a(x)$ は先行研究(ref. 3)と比較的よく一致した。また、洗浄したガラス基板(1.1 mm 厚)に、 CsBr , PbBr_2 と SnBr_2 を化学量論比となるように真空共蒸着(成長速度: $0.5 \text{ \AA/s}$)することで薄膜試料(厚み ~ 500 nm)を作製した。薄膜の光吸収スペクトルを励起子吸収を考慮してフィッティング解析し E_g を評価した結果、先行研究(ref. 2)より各組成で約 100 meV 大きい値が得られた (図 1b)。講演では、単結晶の組成決定法についても議論する。

[1] Y. Xian *et al*, J. Phys. Chem. C **124**, 13434-13446 (2020).

[2] H. A. Schwartz *et al*, ACS Appl. Mater. Interfaces **13**, 4203-4210 (2021).

[3] A. Karmakar *et al*, ACS. Mater. Lett. **3**, 261-267 (2021).

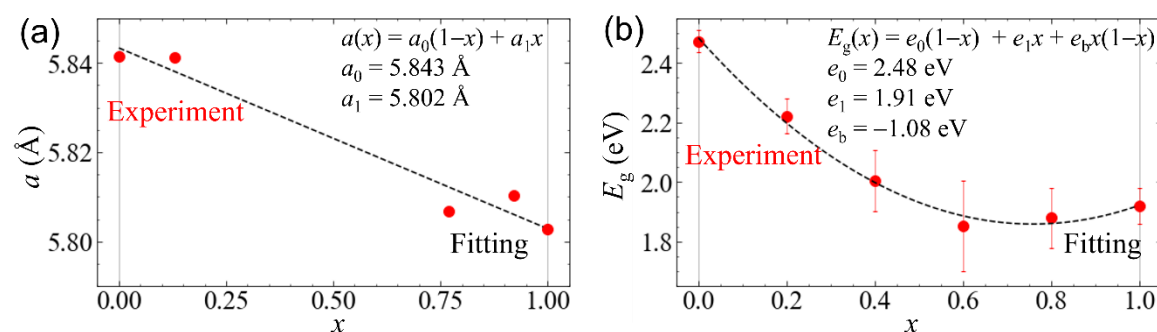


Fig.1. (a) $a(x)$ of $\text{CsSn}_x\text{Pb}_{1-x}\text{Br}_3$ single crystal. (b) $E_g(x)$ of $\text{CsSn}_x\text{Pb}_{1-x}\text{Br}_3$ thin film.

Si 系分子イオン注入エピタキシャルウェーハの Fe ゲッタリング挙動 (2)

Fe gettering behavior of SiH_x and C_2H_y mixture molecular-ion-implanted silicon epitaxial wafer (2)

廣瀬 諒[○], 柗田 亜由美, 門野 武, 小林 弘治, 鈴木 陽洋, 永友 翔, 栗田 一成

SUMCO CORPORATION

E-mail: rhirose@sumcosi.com

【背景】

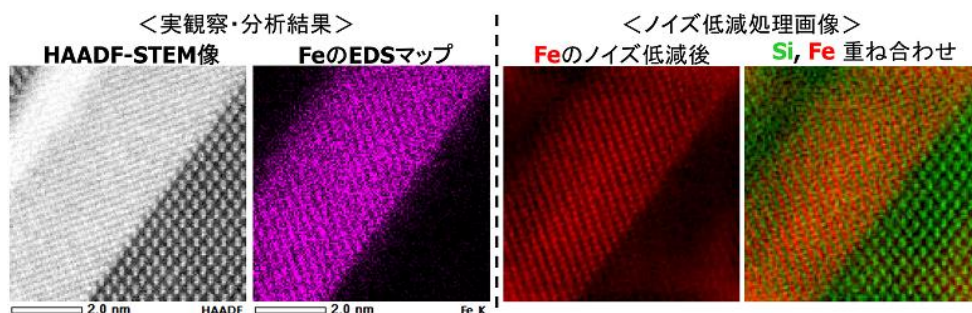
CMOS イメージセンサの高感度化に寄与することを目的として、分子イオン注入技術を用いた近接ゲッタリング技術の開発に取り組んでいる。Si 系分子イオン注入技術は SiH_x^+ および C_2H_y^+ をイオンビームに混合して注入することで、炭素ドーズ量の低い C_2H_y^+ 比率が低い条件においても、重金属を捕獲可能なゲッタリングシンクを形成する技術である^(1,2)。前回の春季応用物理学会では C_2H_y^+ 比率の変化に伴う Fe 捕獲挙動の違いを報告した⁽³⁾。今回は C_2H_y^+ 比率が低い条件で形成されるゲッタリングシンクとなるイオン注入欠陥の Fe 捕獲挙動および形態を調査したので報告する。

【実験方法】

300 mm シリコンウェーハに SiH_x^+ が 95.5%、 C_2H_y^+ が 4.5% の比率で混合した Si 系分子イオン注入を加速エネルギー 80 keV、ドーズ量 5.0×10^{14} ions/cm² で実施した。エピタキシャル成長はイオン注入面に 5 μm 実施した。Fe を裏面から加速エネルギー 180 keV、ドーズ量: 1.0×10^{13} atoms/cm² で注入することで Fe 汚染を実施した。Fe の拡散熱処理は 1000°C・2h で均一拡散させた後、700°C・18h の熱処理を実施した。イオン注入欠陥の構造分析は STEM 観察および STEM-EDS 分析で行った。STEM-EDS 分析結果は分析結果を高速フーリエ変換(FFT)した像に対して、ノイズ低減処理を行った後に逆 FFT で再変換行うことによりノイズ低減処理像とした。

【結果・考察】

図にイオン注入欠陥を HAADF-STEM 観察および STEM-EDS 分析結果とその結果を画像解析した結果を示す。実観察結果から、Fe はイオン注入欠陥内部で周期的に配列していることがわかる。また、ノイズ低減処理画像の重ね合わせにおいて Si と Fe が交互に整列していることから、Fe は母体となる Si 結晶面の間に Fe が規則的に挿入される形態で捕獲されていることが推察される。



図：イオン注入欠陥の HAADF-STEM 像とノイズ低減処理後の STEM-EDS 分析結果

- 【参考文献】 1) R. Hirose *et al.*, M SSP, 135, 106063 (2021). 2) R. Hirose *et al.*, M SSP, 174, 108226 (2024).
3) R. Hirose *et al.*, 第 71 回応用物理春季学術講演会, 24a-12F-9 (2024).

電子線照射後の回復熱処理温度が Si 中欠陥準位の 発光再結合信号に与える影響

Effect of Annealing Temperature after Electron Irradiation on Radiative Recombination of Defect Levels in Si

宮崎大工¹, 株式会社 SUMCO², °原口 佑斗¹, 岩切 孝洋¹, 原田 知季¹, 碓 哲雄¹,
福山 敦彦¹, 佐々木 駿², 三次 伯知²

Univ. of Miyazaki¹, SUMCO Corporation², °Yuto Haraguchi¹, Takahiro Iwakiri¹, Tomoki Harada¹,
Tetsuo Ikari¹, Atsuhiko Fukuyama¹, Shun Sasaki², Noritomo Mitsugi²

E-mail: hk19042@student.miyazaki-u.ac.jp

1. はじめに

一部のパワーデバイス作製時には Si 基板への電子線照射とその後の回復熱処理が行われる。そこで形成される欠陥準位を再結合中心として利用することでデバイスのスイッチング特性を改善できる。しかし形成される欠陥準位の微視的構造は依然として不明であり、早急に解明する必要がある。我々はこれまでに光励起キャリアの非発光再結合を測定する圧電素子光熱変換分光 (PPT) 法や深い準位のトラップを測定する過渡容量分光 (DLTS) 法の結果から、電子線照射後の回復熱処理によって照射直後には見られなかった新たな欠陥準位が導入されたことを報告した¹⁾。本研究では PL 測定を行い、回復熱処理温度の違いが欠陥準位に与える影響を議論した。

2. 試料詳細・実験方法

本研究では *n* 型 Si 基板 (以下 noIR) に電子線照射 (800 kV, 2 MGy) のみを行った試料 IR0 に加えて、電子線照射後に 250~600°C で 20 分間の回復熱処理を行った試料 IR250, IR400, IR500, IR550, IR600 を用意した。PL 測定は LD 励起固体レーザー (473 nm) を試料に照射し、発光再結合による発光を分光した後、InGaAs マルチチャンネル検出器で検出した。測定波長は 800~1800 nm で、測定温度は 4 K で行った。

3. 実験結果・考察

Fig. 1 に 4 K で得られた PL スペクトルを示す。電子線照射のみ行った IR0 では E_g (=1.12 eV) 付近の信号強度が減少し、低エネルギー側には炭素と酸素の複合欠陥準位起因の C-line が出現した。熱処理温度が上がると C-line と約 0.775 eV のピークが減少し、スペクトルは noIR

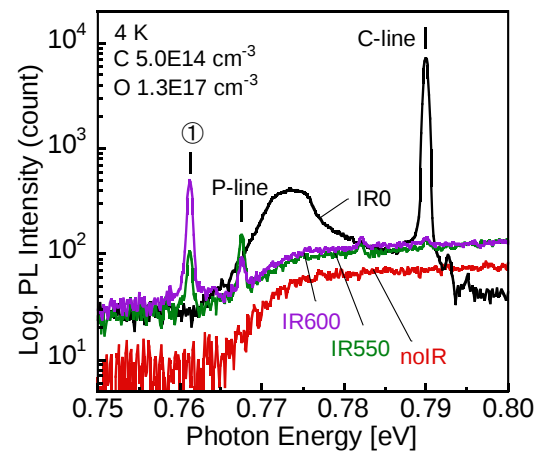


Fig. 1: PL Spectra of electron beam irradiated Si at 4 K

のものに近づいた。そして IR600 では電子線照射前にはほぼ一致するスペクトルが得られた。これらの結果から 600°C で 20 min の熱処理によって Si の結晶構造が十分に回復していることが分かった。しかし、IR550 と IR600 では、これまで報告されていなかった新たなピーク① (0.761 eV) が観測された。このピーク強度は炭素濃度と正の相関関係を示したことから、熱処理時に混入した窒素と炭素および酸素の複合欠陥起因の可能性もある²⁾。あるいは、C-line の減少に伴って出現したことから、その起源である炭素と酸素の複合欠陥が変化した結果、発光ピークが低エネルギー側へ現れた可能性もあり、詳細な議論が必要である。

参考文献

- 1) 原口 佑斗 他, 第 84 回応用物理学会秋季学術講演会, 23a-B205-9, (2023).
- 2) A. Dornen *et al.*, J. Elec. Mater., **17**, 2, 121-125, (1988).

結晶方位分布を考慮した機械学習による結晶欠陥発生予測

Prediction of crystal defect generation by machine learning

considering crystal orientation distribution

名大院工¹, 名大未来研², 理研 AIP³, 名大院情報⁴, 名大未来機構⁵

○(M2) 鳥居 和馬¹, 原 京花¹, 沓掛 健太郎^{1,2,3}, 工藤 博章⁴, 勝部 涼司¹, 宇佐美 徳隆^{1,2,5}

Grad. Eng. Nagoya Univ.¹, IMASS², AIP RIKEN³, Grad. Info. Nagoya Univ.⁴, InFus⁵

○Kazuma Torii¹, Kyoka Hara¹, Kentaro Kutsukake^{1,2,3}, Hiroaki Kudo⁴, Ryoji Katsube¹, Noritaka Usami^{1,2,5}

E-mail: torii.kazuma.j2@s.mail.nagoya-u.ac.jp

【はじめに】多結晶材料において結晶欠陥の存在は材料の機械的、物理的、光学的特性に影響する。例えば機械的強度は粒界密度に強く依存し、熱伝導率は点欠陥の存在により低下する。そのため、結晶欠陥の発生機構の解明と制御が重要である。これは本研究で解析対象とした太陽電池の基板材料の一種である多結晶 Si でも同様であり、バルク中に含まれる転位クラスターがキャリア再結合の要因となって変換効率に悪影響を与えるため、転位クラスターの発生機構解明と抑制が求められる。しかし、多結晶組織は非常に複雑であり、転位クラスターの発生機構の全体像解明には至っていない。先行研究では多結晶組織の光学像と蛍光 (PL) 像から畳み込みニューラルネットワーク (CNN) を用いて組織と転位クラスター発生の関係解析が行われたが^[1]、単独の光学像には結晶組織を特徴づける要素の 1 つである結晶方位の情報が欠落している。本研究では方位情報を含む学習モデルを構築して先行研究の結果と比較することで、結晶方位分布が転位クラスター発生に及ぼす影響を検討した。

【実験方法】まず、多結晶 Si ウエハにテクスチャ処理を施し、内部の結晶方位を反映した表面構造を得た。次に、光の入射方向を変更可能な輝度測定装置でウエハの光学像を、PL イメージング装置で PL 像を撮影した。光学像からは粒や粒界等の組織形状が観察可能であり、PL 像からは転位クラスターの分布が確認できる。また本研究で

は、光学像の輝度値分布が相対的な結晶方位分布を反映している点を利用し、光の入射方向を 45° ずつ変えて撮影した 4 枚の光学像の輝度データを連結することで擬似的な結晶方位データとして使用した。最後に、CNN を用いて光学像から特徴量を抽出し、入力画像の中心ピクセルが転位クラスターを含むか判定するモデルを構築した。この時、結晶方位の転位発生への寄与を調査するため、結晶方位を含まない入力 (GBI)、光学像 1 枚 (OI-1)、光学像 4 枚 (OI-4) のそれぞれで学習したモデルの精度を比較した。

【結果と考察】テスト用ウエハについて、結晶方位情報を含む訓練済みモデルを用いて転位の有無の判定を行った結果を Fig. 1 に示す。各ピクセルについて転位クラスターが存在する箇所を白で表している。正解値と比較すると、主な存在箇所を正しく予測できていることがわかる。また、各モデルの予測精度の比較を Table 1. に示す。比較した中で結晶方位情報を最も多く含む OI-4 モデルの予測精度は 98%、転位判定の分離性を表す AUC (Area Under the Curve, ROC 曲線によって囲まれる面積の大きさは) 98%以上を示した。これは、先行研究におけるモデル (OI-1) と比較しても高い精度であり、転位クラスター発生において結晶方位分布が重要性を持つことが示された。

【謝辞】

本研究は、JST CREST (JP MJCR17J1) の支援のもと行われた。

【参考文献】

[1] K. Hara et al., *APL Mach. Learn.* 1, 036106 (2023).

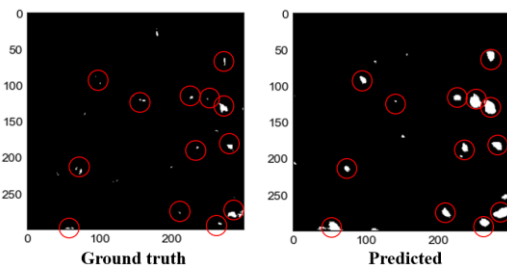


Fig. 1. Ground truth and predicted image of the spatial distribution of dislocation clusters.

Table 1. Comparison of prediction accuracy for the models with various input data.

Input data	Accuracy	AUC
GBI	0.883	0.572
OI-1	0.960	0.961
OI-4	0.981	0.987