

# 博士論文公聴会の公示（物理学専攻）

学位申請者： 藤村 卓功

論文題目： **Cu<sub>4</sub> Complex in Silicon and Its Impurity Reactions with Hydrogen**  
(シリコン中の **Cu<sub>4</sub>** 複合体およびその複合体と水素との不純物反応)

日時： 2018年 2月 X日（木） XX:00 – XX:00

場所： 理学研究科 H棟 7階セミナー室（H701号室）

主査： 小口多美夫

副査： 黒木和彦、越野幹人、松多建策、白井光雲

論文要旨：

シリコン中の銅欠陥は多くの場合半導体製造において有害な作用をなす。しかし、銅原子4個で形成される **Cu<sub>4</sub>** 欠陥には 1.014eV の鋭いフォトルミネッセンス発光を行なうものがあり **Cu<sub>PL</sub>** 欠陥と呼ばれ、発光素子としての可能性が検討されている。応用上 **Cu<sub>PL</sub>** 欠陥の作成過程では水素との不純物反応が重要となる。実験では **Cu<sub>4</sub>** を水素化すると、置換位置 **Cu<sub>(s)</sub>** と水素との反応生成物 **Cu<sub>(s)</sub>H**, **Cu<sub>(s)</sub>H<sub>2</sub>** が観測され、**Cu<sub>4</sub>** が水素によって容易に分解することが示されている。本研究では第一原理計算よりシリコン中の **Cu<sub>4</sub>** 複合体の安定な構造を従来のモデルには捕らわれずに探索し、その結果、より安定な構造を発見し、それに基づき **Cu<sub>4</sub>** 複合体と水素との不純物反応を明らかにした。従来はこの欠陥の構造は銅原子が置換位置に1個、格子間位置に3個で構成される **Cu<sub>(s)</sub>Cu<sub>3(i)</sub>** と考えられてきたが、最安定構造は4個の格子間位置 **Cu** が正四面体 **Cu<sub>4(i)</sub>V<sub>Si</sub>** である。**Cu<sub>4(i)</sub>V<sub>Si</sub>** の形成エネルギーやドナー準位は実験値と整合するものであった。

水素によって **Cu<sub>4</sub>** が分解したときの最終生成物は **Cu<sub>(s)</sub>H<sub>3</sub>** であることを明らかにした。構造探索でしばしば現れた複合体 **Cu<sub>(H)</sub>H** を考慮し反応過程を考察すると、中間生成物として **Cu<sub>(s)</sub>H**, **Cu<sub>(s)</sub>H<sub>2</sub>** が出現し、実験の観測と一致する。この研究により、複雑な **Cu<sub>4</sub>** の生成機構、複雑な欠陥反応の機構がより統一的に理解されるようになった。本研究は半導体中の不純物制御に貢献するものである。