HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	イオン注入を利用した対応粒界原子構造制御
Author(s)	坂口, 紀史; 渡辺, 精一; 木下, 博嗣 他
Citation	まてりあ, 47(12), 638-638 https://doi.org/10.2320/materia.47.638
Issue Date	2008-12-01
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/76946
Type	journal article
File Information	Materia v. 47(12) 638.pdf

Hokkaido University Collection of Scholarly and Academic Papers : HUSCAP

イオン注入を利用した対応粒界原子構造制御

北海道大学エネルギー変換マテリアル研究センター　坂口紀史　渡辺精一
北海道大学大学院工学研究科　木下博嗣
理化学研究所フロンティア研究システム　市野瀬英喜

現在，新しい概念に基づく素子の開発にあたり，ナノメートル程度の極微小な大きさを持ち，かつそれらが周期的に配列した「量子構造」作製技術の開発が切望されている．他方，Si等の共有結合性結晶で頻繁に見られる対応粒界は特徴的な構造ユニットをもつことから，不純物元素を構造ユニット内の特定サイトに置換させることで，対応粒界の周期性を反映した量子構造が形成されると考えられる．本研究ではイオン注入法を利用し，共有結合性結晶の対応粒界原子構造制御の可能性について検討した．

超高純度多結晶Siを3 mmディスク状に加工し，Arイオン研磨により薄片化したTEM試料に対し，タングステンをイオン注入した．その後，Arイオン研磨で表面汚染層を取り除き，超高圧電子顕微鏡内で973 K，30分間加熱保持した後室温まで冷却し，{112}Σ3対応粒界の結晶構造像を取得した．さらに，同粒界を電界放射型分析電子顕微鏡によりEELS分析した．

Fig. 1は，タングステンイオン注入後，973 Kで30分間加熱保持した試料における，{112}Σ3対応粒界より得られたEELSスペクトルである．粒界部より得られたスペクトルは，タングステンの存在を示す明瞭な吸収端構造が見られている．

タングステンが偏析した{112}Σ3対応粒界を高分解能観察したところ，規則的な構造ユニットが観察された．左右対称な原子構造を有するシリコン{112}Σ3対応粒界中には五配位シリコン原子が存在することより[1]，五配位シリコン原子をタングステンの偏析サイトと仮定した粒界原子構造モデルを作成した．同モデルを用いて高分解能TEMシミュレーション像を計算したところ，観察結果と矛盾しないコントラストが得られた(**Fig. 2**)．さらに，平面波基底擬ポテンシャル法に基づく第一原理電子状態計算により構造モデルの妥当性を検討したところ，タングステン(図中赤丸)を含む安定な粒界原子構造(**Fig. 3**)は，前述の粒界原子構造モデルと良く一致した．以上の結果より，イオン注入されたタングステン原子は，その後の熱処理過程で対応粒界中の配位数欠陥原子と優先的に置換することが示唆される．

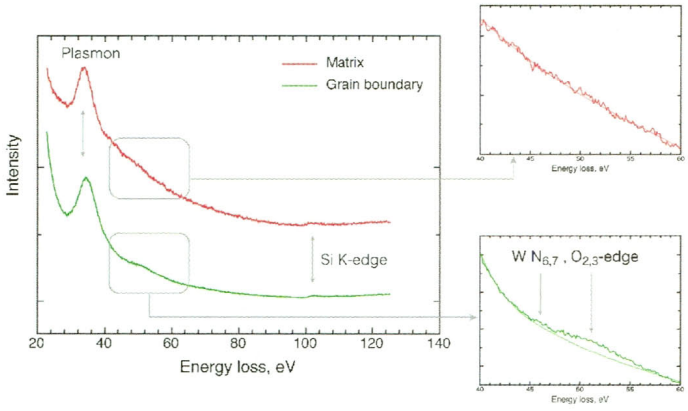


Fig. 1　タングステンイオン注入後，973 Kで30分間加熱保持したシリコン{112}Σ3対応粒界より得られたEELSスペクトル．

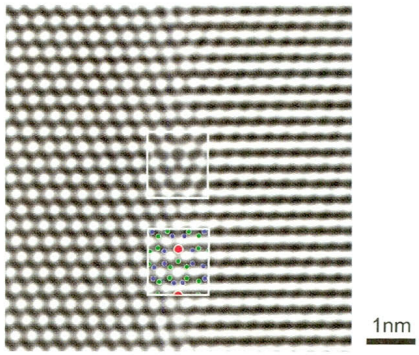


Fig. 2　タングステンが偏析したシリコン{112}Σ3対応粒界のHRTEM像と構造モデルならびにシミュレーション像．

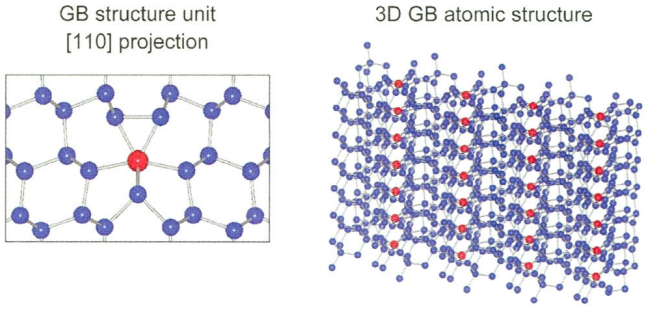


Fig. 3　第一原理電子状態計算より求められた粒界構造モデル(投影図)と三次元粒界原子構造．

文　献

(1) N. Sakaguchi, H. Ichinose and S. Watanabe: Mater. Trans., **48**(2007), 2585–2589.

(2008年7月25日受理)

Fabrication of Quantum Structure Utilizing CSL Boundary by Ion Implantation; Norihito Sakaguchi*, Seiichi Watanabe*, Hiroshi Kinoshita**, Hideki Ichinose*** (*Center for Advanced Research of Energy Conversion Materials, Hokkaido University, Sapporo. **Faculty of Engineering, Hokkaido University, Sapporo. ***Frontier Research System, Riken, Saitama)
Keywords: *Si, tungsten implantation, coincidence-site lattice (CSL) boundary*
Irradiation condition: 50 keV W^+, 1×10^{15} W^+ ions/m^2
TEM specimen preparation: ion milling (final condition: 3 keV Ar^+ irradiation angle 3°)
TEM utilized: JEL-ARM-1300 (1250 kV, HRTEM), JEM-2010F (200 kV, EELS)