

## 3. X線セクショントポグラフィの計算機シミュレーション

— FZ-Si 結晶中の歪み中心の評価 —

沖 津 康 平

歪み、或いは欠陥を含んだ結晶のX線セクショントポグラフィ図形（セクション図形）を、歪んだ結晶に対する動力学理論（高木-トウパンの式）を用いた計算機シミュレーションにより求める研究を行なった。

本研究の主な成果として、FZ-Si 結晶中に、歪み中心が存在することを報告している。これは、実験によるセクション図形にシミュレーション図形をフィッティングさせることにより得られた結果である。

歪み中心のサイズは、 $> 10 \mu\text{m}$ と評価されたが、バルク単結晶としては完全性の極致に達しているといわれるFZ-Si 結晶中に、このような大型の欠陥が存在することは、予想外であり、デバイス形成用基板としての応用面で大きな問題となる。

一方、X線回折学における本研究の意義は、一つの大きな歪み中心を含んだ結晶のセクション図形を初めて確認したことにある。

実験によるセクション図形にシミュレーション図形をフィッティングさせて結晶欠陥、或いは歪みを特定しようとする試みは、以前より為されていたが、シミュレーションの際仮定する格子欠陥は、転位、双晶、微小角粒界等であり、一つの歪み中心を仮定し、かつ実験結果とフィッティングさせたという前例はないと思う。

歪み中心は、最高(14 14 0)の、高次反射によるセクショントポグラフィにより検出されたが、これほど高次の反射は実験室系では実現できず、シンクロトロン放射光の短波長(0.4Å)を用いて初めて可能となったものである。

歪み中心を仮定してのシミュレーションを始めるにあたっては、かなりの準備が必要であった。すなわち、高木-トウパンの式を数値的に解く手法、プログラムが正しい結果を与えることを確認する必要があった。

その為にまず、完全結晶、更に、積層欠陥、微小角粒界を含む結晶に対するシミュレーションを行ない、実験との対応に於いて実績のある解析解、或いは数値解との比較を行なった。また、結晶によるX線の吸収、異常透過現象（ボルマン効果）が正しく扱えるかどうかの確認を行ない、これらのことに多くの紙数をさいている。

#### 4. 放射光による高次反射セクショントポグラフィ法とその応用

竹野 博

高エネルギー物理学研究所の放射光実験施設において、シンクロトロン放射光の特長を十分に活かした高次反射のセクショントポグラフィ法を確立した。単色化した  $0.4 \text{ \AA}$  の放射光を用いて、シリコン結晶のセクショントポグラフィを  $(4\ 4\ 0)$  から  $(18\ 18\ 0)$  反射まで、また  $(8\ 0\ 0)$  から  $(24\ 0\ 0)$  反射まで撮影することに成功した。さらに、セクショントポグラフィ中に現われるペンデル縞の変化からスタティック・デバイーワラー因子を測定し、シリコン結晶の完全性の評価を行った。トポグラフィ的には、結晶育成時に形成される成長縞を観察することで、格子歪みに関する知見を得た。従来のトポグラフィ法では、低温熱処理 ( $650^\circ\text{C}$ ) を施した MCZ-Si 中の微小酸化物析出物、あるいは FZ-Si 中の D 欠陥による格子歪みを非破壊的手段で検出することは不可能であった。しかし、歪みに対してより敏感になる、より高次の散乱ベクトルを用いた本研究において、それらの格子歪みを初めて非破壊的手段で検出できた。さらに、欠陥の形状や変位場などを仮定してスタティック・デバイーワラー因子のモデル計算を行い、その計算結果と実験結果とを比較することで、微小欠陥の大きさと濃度を評価できた。