第一原理計算による Si 結晶中の Cu 不純物原子と ドーパント原子の相互作用解析*

末岡 浩治^{*1}, 大原 茂大^{*2}, 福谷 征史郎^{*1}

First Principle Calculations on Interaction between Cu Atom and Dopants in Silicon Crystal

Koji SUEOKA^{*3}, Shigehiro OHARA and Seishiro FUKUTANI

^{*3} Department of System Engineering, Okayama Prefectural University,
111 Kuboki, Soja-shi, Okayama, 719-1197 Japan

For finding the effective gettering center of copper (Cu) impurity atom in silicon crystal, an interaction between interstitial Cu atom and substitutional dopant or carbon (C) atom was studied by first principle calculations. The interaction energies of Cu and boron (B), antimony (Sb), arsenic (As), phosphorus (P) or C were estimated. It was found that only B can be an effective gettering center for Cu. This result indicates that heavily B doped *p/p*+ epitaxial wafers will show a sufficient gettering efficiency for Cu contamination. The other calculations showed that vacancy (Vcy)-Sb, Vcy-As or Vcy-P complexes can be formed. In order to design the gettering center for Cu in *n/n*+ epitaxial wafers, the interaction between these complexes and Cu was investigated. It was found that these complexes can be an effective gettering center for Cu. This result proposes a new Cu gettering technique in *n/n*+ epitaxial wafers with the formation of Vcy-Sb, Vcy-As or Vcy-P complexes.

Key Words: First Principle Calculation, Silicon Crystal, Gettering, Cu Impurity, Interaction Energy

1. 緒 言

半導体 Si 単結晶中の遷移金属 (以下 TM と記す) 不純物は格子間位置に入るため, Si 結晶中の拡散係数が大きい. そのため, TM 不純物は厚さ約 700 μm の Si ウェーハの表面から裏面まで容易に拡散する. さらに TM 不純物は Si のバンドギャップ中に深い準位を形成して, キャリアの再結合中心となることが知られている⁽¹⁾. これらの性質から TM 不純物は Si ウェーハ表面から数 μm の領域で製造される LSI の特性劣化の要因となる. そのため, TM 不純物を LSI 製造領域から取り除き, Si ウェーハ内部のより深い領域へと閉じこめる技術が研究されている. この技術はゲッタリングと呼ばれる. ゲッタリングは, Si ウ

ェーハの抵抗率を制御するために添加されるドーパント原子などが TM 不純物と相互作用して安定な複合体を形成することにより起こる. この TM 不純物と相互作用するドーパント原子などをゲッタリングセンターと呼ぶ.

TM 不純物の中で, Fe と Ni のゲッタリング技術については多くの報告がある⁽²⁾. LSI 製造用の主要基板である B を高濃度 ($5 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ 以上) に添加した基板 (p+基板) の上に p 型の Si 薄膜をエピタキシャル成長させた p/p+エピタキシャルウェーハ (以下エピウェーハと記す) では, p+基板中の B が Fe と複合体を形成する, すなわち B が Fe のゲッタリングセンターとなることが知られている⁽³⁾. 一方, B は Ni の有効なゲッタリングセンターとならないことも周知であり, 析出した Si 酸化物を Ni のゲッタリングセンターとして活用する技術が確立している⁽⁴⁾.

* 原稿受付 2004 年 12 月 16 日.

^{*1} 正員, 岡山県立大学情報工学部 (〒719-1197 総社市窪木 111).

^{*2} 岡山県立大学大学院機械情報システム工学専攻.
E-mail: sueoka@cse.oka-pu.ac.jp

最近では LSI の高性能化に伴って配線として用いられ始めている Cu が注目されている。TM 不純物の中でも Cu は Si 中を非常に高速で拡散することが知られている⁽⁵⁾。このため、Cu による電気特性劣化が懸念されており、Cu のゲッタリング技術についての精力的な研究開発が始まった段階にある。p/p+エピウェーハのみならず、パワーデバイス製造用基板として需要を伸ばしている Sb, As や P などの 5 族元素を高濃度 ($5 \times 10^{18} / \text{cm}^3$ 以上) に添加した基板 (n+基板) の上に n 型の Si 薄膜をエピタキシャル成長させた n/n+エピウェーハについても、Cu のゲッタリング技術確立は急務である。

第一原理計算は経験的パラメータを含まず、実験結果を定量的かつ統一的に理解する可能性を与える手法であるため、Si 結晶中の点欠陥⁽⁶⁾や点欠陥とドーパントの複合体^{(7) (8)}、さらには TM 不純物^{(9) (10)}の安定構造、電子構造や拡散機構等を研究対象として膨大な報告がなされてきた^{(6) - (11)}。しかし、TM 不純物のゲッタリングを対象とした計算は、最近の道北ら⁽¹²⁾の研究があるものの、報告は少ない。

本研究は、第一原理計算により求めた全エネルギーの差によって Cu と 3 族、5 族元素であるドーパントあるいは C との相互作用エネルギーを推定することにより、Cu の有効なゲッタリングセンターを探索することを目的としている。さらに、原子空孔 (Vcy) と 5 族元素からなる複合体と Cu の相互作用エネルギーについても計算することで、n/n+エピウェーハにおける Cu の新しいゲッタリング技術の提案を試みた。

2. 計算方法

本研究での計算は密度汎関数法⁽¹³⁾に基づく局所密度近似と擬ポテンシャル法を用いた第一原理計算法で行った。用いたプログラムパッケージは CASTEP⁽¹⁴⁾である。この手法では、与えられた原子配置に対して電子系の支配方程式である Kohn-Sham 方程式⁽¹⁵⁾を解くことによって系の基底状態を求める。波動関数を平面波で展開し、さらに平面波の数を少なくするためウルトラソフト擬ポテンシャル⁽¹⁶⁾を用いた。平面波のカットオフエネルギーは 310 eV である。交換相関項の評価には密度勾配展開法を採用し、Perdew ら⁽¹⁷⁾により提案されている関数形を使用した。波動関数の最適化には RMM-DIIS 法を用い、charge-mixing には Pulay 法を用いた⁽¹⁸⁾。また、原子配置の最適化 (格子緩和) には BFGS 構造最適

化法⁽¹⁹⁾を用いた。k 点は Monkhorst-Pack のスペシャルポイント⁽²⁰⁾で $2 \times 2 \times 2$ の 8 点を取っている。

Si 結晶はダイヤモンド構造を有し、単位胞は 8 個の Si 原子を含む。計算では Cu 原子とドーパントの複合体などの不純物を扱うため、単位胞を $2 \times 2 \times 2$ 倍した Si 原子 64 個からなる超格子を用いた。図 1 に Si 結晶の単位胞と格子間位置である Tetrahedral site (T サイト), Hexagonal site (H サイト), Split interstitial site (S サイト), Bond center site (Bc サイト) を示す。Cu 原子を各サイトに置き、格子緩和して最安定位置を求めた。さらに超格子の中心位置に存在する Si 原子をドーパント (B, Sb, As, P) あるいは C 原子と置き換えることでこれらを置換位置に配置し、これらの原子に最も近い各格子間位置に Cu 原子を置いて格子緩和することで各種複合体を含む超格子の全エネルギーを計算した。計算精度を確認する目的で、格子間 Fe と B, 格子間 Ni と B の相互作用エネルギーも計算した。さらに、Vcy と 5 族元素からなる複合体と Cu の相互作用エネルギーも計算した。

Fig.1 T, H, S and Bc sites in an unit cell of Si crystal.

エネルギー禁制帯を持つ Si 結晶では、点欠陥や TM 不純物は禁制帯中に電子準位を形成する。フェルミ準位との位置関係に応じて、この電子準位とフェルミ準位との間で電子のやり取りが起こり、その結果、点欠陥⁽⁶⁾や TM 不純物^{(9) (10)}は様々な荷電状態を取る。たとえば、Vcy は -2 から +2 までの 5 つの荷電状態を取ることが報告されている⁽⁶⁾。そのため、厳密には荷電状態を考慮して各種欠陥を含む超格子の全エネルギー計算を行い、フェルミ準位の位置に応じて相互作用エネルギーを求める必要がある。しかしながら、荷電状態を考慮して相互作用エネルギーを求めるには膨大な計算が必要となるため、本研究では荷電状態として中性の場合のみを扱った。

3. 結果 お よ び 考 察

3-1 Cu の最安定位置および Cu と B の相互作用エネルギー 全エネルギーの計算結果から, Cu の最安定位置は T サイトと決定できた. また Fe の最安定位置は Cu と同じく T サイト, Ni の最安定位置は H サイトと決定できた. さらに B と Cu, Fe, Ni の各複合体の全エネルギー計算結果から, (1)式で B と格子間 TM 不純物 X の相互作用エネルギー E_f を計算した.

$$E_f = \{ E_{tot}(\text{Si}_{63}\text{B}_1) + E_{tot}(\text{Si}_{64}\text{X}_1) \} \\ - \{ E_{tot}(\text{Si}_{63}\text{B}_1\text{X}_1) + E_{tot}(\text{Si}_{64}) \} \quad (1)$$

ここで, E_{tot} は計算から求まる系の全エネルギーで, 括弧内がその系に含まれる原子の種類と個数を示す. 右辺の第一括弧内が系の始状態であり, 第二括弧内が系の終状態を表す. 始状態は格子間 TM 不純物 X と B がそれぞれの超格子の中で安定している状態で, X が B の存在する超格子に移動して複合体を形成した状態が終状態である. その始状態と終状態の差であるエネルギーの利得が E_f であり, $E_f > 0$ であれば X は B と複合体を形成した方が安定となる.

表 1 に X と B の相互作用エネルギー E_f と X と B 間の距離の計算結果を示す. まず, これまで精力的に実験がなされ, 信頼しうる実験値が報告されている Fe と B の E_f について, 本計算結果と実験値を比較することで, 計算精度を検証した. Fe と B の結合エネルギーの実験値として Lemke⁽²¹⁾ は 0.65 eV, Hayamizu ら⁽²²⁾ は 0.68 eV の値を報告している. これらの実験値は表 1 に示す計算結果である 0.73 eV と非常に近い値であることから, 本計算の精度は高いと判断した.

Table 1 Calculated interaction energy E_f and distance between interstitial X and substitutional B.

X	Site of X	E_f (eV)	Distance (Å)
Cu	T	1.15	2.07
Fe	T	0.73	2.12
Ni	H	0.49	2.12

表 1 の計算結果から, B との相互作用エネルギーは Cu が最も大きく, Ni が最も小さいことがわかる. この計算結果は, B を高濃度に添加した p+p+エピウェーハにおいて Cu は最も効果的に B によりゲッタリングされること, 逆に Ni は B によるゲッタリングが起りにくいことを示している. この傾向は, 最近の精

緻な化学分析による実験結果⁽²³⁾と一致している. また, Cu が B によりゲッタリングされることを示す本結果は, 道北ら⁽¹²⁾が第一原理計算により帰結した結果と一致している.

Cu と B の結合の性質を, 価電子密度分布により調べた. 図 2 に Si (110) 面の価電子密度分布の計算結果を示す. これより, Cu は周囲の Si よりも B に接近し, Cu と B の結合中心部において, Cu3d-B2p 間の混成軌道の存在に起因して価電子密度が高くなっていることがわかる. すなわち共有結合性を有している. 次に, 平面波状態を擬ポテンシャルから作成した局在原子軌道基底関数に投影し⁽²⁴⁾, マリケンの方法⁽²⁵⁾で解析することで, Cu と B の価電子数を計算した. その結果, Cu の価電子数は 10.28 個, B の価電子数は 3.76 個となった. 故に, Cu は+に帯電し, B は-に帯電していることがわかる. すなわち, Cu と B の間にはイオン結合性も存在する. 以上の解析から, Cu と B 間の結合は, 共有結合性とイオン結合性を併せ持つ強い結合であることがわかった.

Fig.2 Stable configuration and valence electron density of interstitial Cu and substitutional B complex in Si (110) plane. The maximum contour of the density is set to 0.8 electron /Å³.

3-2 Cu と 5 族のドーパント、Cu と C との相互作用エネルギー

Cu と 5 族のドーパントである Sb, As, P の各複合体についても, B と同様に系の全エネルギーを計算した. さらに, (1)式において B を Sb, As, P に置き換えるとともに X=Cu として, Cu と 5 族のドーパントとの相互作用エネルギー E_f を求めた.

表 2 に Cu と Sb, As, P の相互作用エネルギー E_f と Cu と Sb, As, P 間の距離の計算結果を示す. これより, Sb と P は $E_f < 0$ であり, Cu と複合体を形成し

ない方が安定であることがわかる。また, As は $E_f = 0.06$ eV と正の値であったが, 相互作用エネルギーとしては非常に小さい。以上の結果は, 5 族のドーパントである Sb, As, P は Cu のゲッターリングセンターとしないことを示している。

Table 2 Calculated interaction energy E_f and distance between interstitial Cu and substitutional Sb, As, P or C.

Dopant	Site of Cu	E_f (eV)	Distance (Å)
Sb	T	-1.28	2.85
As	T	0.06	2.61
P	T	-0.14	2.47
C	T	-0.13	2.29

Cu と 5 族のドーパントの E_f が非常に小さい理由を明らかにするため, 価電子密度分布を計算した。Cu と Sb の結合について, Si (110) 面の価電子密度分布の計算結果を図 3 に示す。

Fig.3 Stable configuration and valence electron density of interstitial Cu and substitutional Sb complex in Si (110) plane. The maximum contour of the density is set to 0.8 electron /Å³.

図 3 より, Cu は Sb から遠ざかり, むしろ周囲の Si に接近していることがわかる。Cu と Sb 間の価電子密度は低く, 共有結合性は弱いと考えられる。また, 両者の価電子数を計算した結果, Cu の価電子数は 10.63 個, Sb の価電子数は 4.32 個となった。すなわち, Cu, Sb とともに+に帯電し, 斥力的な相互作用が働いていることがわかる。As, P についても同様の解析結果が得られた。以上の解析から, 共有結合とイオン結合がともに生じていないことが, Cu と 5 族のド

ーパントの E_f が非常に小さい理由であると考えられる。

表 2 には, Cu と C の相互作用エネルギー E_f と Cu と C 間の距離の計算結果も示している。表 2 からわかるように, Cu と C については $E_f < 0$ であり, Cu と C は複合体を形成しない方が安定である。C は 4 族元素であり, 半導体 Si 結晶の抵抗率を変化させない。そのため, 欠陥制御技術の 1 つとして, C を約 10^{16} /cm³ の濃度で積極的に Si 結晶に添加する場合がある。添加された C 原子は, 格子間 Si 原子⁽²⁶⁾ や Si の格子間位置に存在する O 原子⁽²⁷⁾ と相互作用して複合体を形成したり, Si 酸化物の析出を促進する⁽²⁸⁾ ことも知られている。しかしながら, この計算結果は, n/n+エピウェーハでは, C を添加しても Cu のゲッターリングが期待できないことを示している。なお, Cu が C によりゲッターリングされないことを示す本結果は, 道北ら⁽¹²⁾ が第一原理計算により帰結した結果と一致している。

3-3 Vcy と 5 族のドーパントからなる複合体による Cu のゲッターリング技術の検討

n/n+エピウェーハに Cu のゲッターリングを付与する目的で, Vcy が関与したゲッターリングセンターを探索した。ところで, LSI 製造工程において問題となる Cu の汚染濃度は約 $10^{10} - 10^{12}$ /cm³ である。後述するが, Si 結晶中にこの Cu の汚染濃度以上の濃度で Vcy を存在させる技術が数種類報告されている。ここでは, まず, Vcy と 5 族のドーパントの相互作用エネルギーを計算した。

計算において, 系の始状態は Vcy と 5 族のドーパント D がそれぞれの超格子の中で安定している状態とし, Vcy が D の存在する超格子に移動して複合体を形成した状態を終状態とした。複合体の最安定構造は, Vcy の最近接となる置換位置に D を置き, 格子緩和して得た。さらに全エネルギーの計算結果から, 相互作用エネルギー E_f を(2)式で求めた。

$$E_f = \{ E_{tot}(\text{Si}_6\text{Vcy}_1) + E_{tot}(\text{Si}_6\text{D}_1) \} - \{ E_{tot}(\text{Si}_6\text{Vcy}_1\text{D}_1) + E_{tot}(\text{Si}_6) \} \quad (2)$$

表 3 に Vcy と Sb, As, P の相互作用エネルギー E_f の計算結果を示す。これより, いずれのドーパントも $E_f > 1.0$ eV と大きな値を有することがわかる。この結果は, 5 族のドーパントである Sb, As あるいは P は容易に Vcy と複合体を形成することを示している。As, P が Vcy と複合体を形成した方が安定である本

計算結果は、すでに報告されている第一原理計算結果^{(7) (8)}と一致している。この複合体を、以後 Vcy-D 複合体と記す。

Table 3 Calculated interaction energy E_f between Vcy and substitutional Sb, As or P.

Dopant D	E_f (eV)
Sb	1.48
As	1.30
P	1.25

次に、Vcy-D 複合体と Cu の相互作用について検討した。計算では Vcy-D 複合体の近傍の各格子間位置に Cu を置き、格子緩和して最安定構造を求めた。その結果、Cu は Vcy と強く相互作用して Vcy の位置へ入る、すなわち置換位置に存在する場合が最安定であることがわかった。そこで、(3)式を用いて相互作用エネルギー E_f を計算した。

$$E_f = \{ E_{tot}(\text{Si}_{62}\text{Vcy}_1\text{D}_1) + E_{tot}(\text{Si}_{64}\text{Cu}_1) \} - \{ E_{tot}(\text{Si}_{62}\text{Cu}_1\text{D}_1) + E_{tot}(\text{Si}_{64}) \} \quad (3)$$

表 4 に Cu と Vcy-D 複合体の相互作用エネルギー E_f と Cu と D 間の距離の計算結果を示す。これより、いずれの Vcy-D 複合体も Cu との相互作用エネルギー E_f が約 3 eV と非常に大きな値を有することがわかる。すなわち、Vcy-D 複合体は非常に有効な Cu のゲッタリングセンターとなることがわかった。

Table 4 Calculated interaction energy E_f between interstitial Cu and Vcy-D complexes. The distance of Cu and D in the stable complexes is also shown.

Dopant D	E_f (eV)	Distance of Cu and D ($\text{\AA}$)
Sb	2.85	2.45
As	3.18	2.33
P	3.32	2.27

Vcy-D 複合体と Cu の相互作用により形成した複合体の結合の性質を価電子密度分布により調べた。D が Sb の場合について、Si (110) 面の価電子密度分布の計算結果を図 4 に示す。これより、置換位置の Cu と Sb および Cu と Si の結合中心部において価電子密度が高くなっていることがわかる。すなわち、Cu は

Fig.4 Stable configuration and valence electron density of substitutional Cu and substitutional Sb complex in Si (110) plane. The maximum contour of the density is set to 0.8 electron / $\text{\AA}^3$.

Vcy が存在していた置換位置に入ることによって Sb および Si と共有結合を形成することがわかる。同様の傾向が As, P についても見られた。一方、価電子数を計算した結果、D が Sb の場合には Cu の価電子数は 10.86 個、Sb の価電子数は 4.34 個、D が As の場合には Cu の価電子数は 10.78 個、As の価電子数は 4.66 個、D が P の場合には Cu の価電子数は 10.67 個、P の価電子数は 5.27 個となった。故に、いずれの場合も Cu は+に帯電し、一方 D は Sb と As の場合には+に、P の場合には-に帯電していることがわかる。すなわち Cu と Sb, Cu と As の間には斥力が、Cu と P の間には引力が働いている。以上の解析から、(1) 格子間位置に存在する Cu は Vcy-D 複合体と相互作用し、その結果 Vcy が存在していた置換位置に入り、D および Si と強い共有結合を形成して安定化すること、(2) D が P の場合にはさらにイオン結合も生じることがわかった。

Vcy を Cu の汚染濃度以上に存在させる技術として、(1) Si ウェーハの窒素雰囲気中熱処理⁽²⁹⁾、(2) Si ウェーハの急速昇降温処理⁽³⁰⁾、(3) Si 結晶成長速度の最適化⁽³¹⁾、などが報告されている。これらの技術と Vcy-D 複合体の形成熱処理技術の組み合わせにより、n/n+エピウェーハへの Cu のゲッタリング付与が可能となると予測する。

本研究では、各種欠陥の荷電状態として中性の場合のみを扱った。荷電状態を考慮することで、より正確な相互作用エネルギーの計算値が得られると期待できる。この点については、今後の研究課題としたい。

4. 結 言

第一原理計算により Cu と 3 族, 5 族元素であるドーパントあるいは C との相互作用エネルギーを推定することにより, 半導体 Si 単結晶中の Cu の有効なゲッターリングセンターを探索した. 格子間位置に存在する Cu と B, Sb, As, P, C との相互作用エネルギーを計算した結果,

- (1) B は Cu の有効なゲッターリングセンターとなる, すなわち p/p+エピウェーハでは Cu のゲッターリングが期待できること,
- (2) Sb, As, P, C は Cu のゲッターリングセンターとならないこと,

がわかった.

5 族のドーパントを含む n/n+エピウェーハに Cu のゲッターリングを付与する目的で, Vcy が関与したゲッターリングセンターを探索した. その結果,

- (3) Vcy-Sb, Vcy-As あるいは Vcy-P 複合体が非常に有効な Cu のゲッターリングセンターになること, を見いだした.

この計算結果から, n/n+エピウェーハに Cu のゲッターリングを付与するために, Cu の汚染濃度以上の濃度で Vcy-Sb, Vcy-As あるいは Vcy-P 複合体を形成しておく新しいゲッターリング技術を提案した.

本研究を遂行するにあたり, ご討論頂いた岡山県立大学情報工学部の芝世式助手に感謝する. 本研究の一部は, (財) 中国電力技術研究財団の援助を受けて行われた.

文 献

- (1) Weber, E.R., *Appl. Phys. A*, **30** (1983), 1.
- (2) 志村史夫, 半導体シリコン結晶工学, (1993), 356, 丸善.
- (3) Hieslmair, H., Istratov, A.A., Flink, C., McHugo, S.A., and Weber, E.R., *Physica B*, **273-274** (1999), 441.
- (4) Sueoka, K., Sadamitsu, S., Koike, Y., Kihara, T., and Katahama, H., *J. Electrochem. Soc.*, **147** (2000), 3074.
- (5) Istratov, A.A., Flink, C., Hieslmair, H., Weber, E.R., and Heiser, T., *Phys. Rev. Lett.*, **81** (1998), 1243.
- (6) たとえば, Watkins, G.D., *Defects in Silicon III*, (1999), 38.
- (7) Car, R., Kelly, P.J., Oshiyama, A., and Pantelides, S.T., *Phys. Rev. Lett.*, **54** (1985), 360.
- (8) Mueller, D.C., Alonso, E., and Fichtner, W., *Phys. Rev.*, **B68** (2003), 045208.
- (9) Fazzio, A., Caldas, M.J., and Zunger, A., *Phys. Rev.*, **B32** (1985), 934.
- (10) Woon, D.E., and Marynick, D.S., *Phys. Rev.*, **B45** (1992), 13383.
- (11) たとえば, 押山淳, コンピュータによるシリコンテクノロジー-II, (1990), 1, 海文堂.
- (12) 道北俊行, 白井光雲, 吉田博, 応用物理学会シリコンテクノロジー分科会研究集会予稿集, No.59 (2004), 47.
- (13) Hohenberg, P., and Kohn, W., *Phys. Rev.*, **136** (1964), B864.
- (14) The CASTEP code is available from Accelrys Software Inc.
- (15) Kohn, W., and Sham, L.J., *Phys. Rev.*, **140** (1965), A1133.
- (16) Vanderbilt, D., *Phys. Rev.*, **B41** (1990), 7892.
- (17) Perdew, J., Burke, K., and Ernzerhof, M., *Phys. Rev. Lett.*, **77** (1996), 3865.
- (18) Kresse, G., and Furthmüller, J., *Phys. Rev.*, **B54** (1996), 11169.
- (19) Fischer, T., and Almlof, J., *J. Phys. Chem.*, **96** (1992), 9768.
- (20) Monkhorst, H., and Pack, J., *Phys. Rev.*, **B13** (1976), 5188.
- (21) Lemke, H., *Phys. Stat. Sol. (a)*, **64** (1981), 215.
- (22) Hayamizu, Y., Tobe, S., Takeno, H., and Kitagawara, Y., *Semiconductor Silicon 1998*, (1998), 1080.
- (23) Hoelzl, R., Blietz, M., Fabry, L., and Schmolke, R., *Semiconductor Silicon 2002* (2002), 608.
- (24) Sanchez - Portal, D., Artacho, E., and Soler, J.M., *Solid State Communication*, **95** (1995), 685.
- (25) Mulliken, R.S., *J. Chem. Phys.*, **23** (1955), 1833.
- (26) Nakamura, K., Suewaka, R., Saishoji, T., and Tomioka, J., *Proceedings of the Forum on the Science and Technology of Silicon Materials 2003* (2003), 161.
- (27) Shimura, F., *J. Appl. Phys.*, **59** (1986), 3251.
- (28) Kishino, S., Matsushita, Y., and Kanamori, M., *Appl. Phys. Lett.*, **35** (1979), 213.
- (29) Falster, R., *Proceedings of the Forum on the Science and Technology of Silicon Materials 2001* (2001), 241.
- (30) Akatsuka, M., Okui, M., Morimoto, N., and Sueoka, K., *Jpn. J. Appl. Phys.*, **40** (2001), 3055.
- (31) Voronkov, V.V., *J. Crystal Growth*, **59** (1982), 625.