

## 《小特集》

## シリコン結晶成長の分子動力学シミュレーション

本岡輝昭\*

**ABSTRACT** Molecular dynamics simulations have been performed to investigate growth mechanisms and defect formation processes during crystallization from melted Si and solid phase epitaxy (SPE) by using molecular dynamics simulations combined with the Tersoff potential. The melt growth in the [001] direction was rate-limited by a diffusion process of Si to be trapped at the kink sites associated with {111} facets formed at the solid/liquid Si interface, while in the [111] direction double-layered two-dimensional nucleation was first created and then followed by double-step layer-by-layer growth. In the case of SPE, layer-by-layer crystallization along the (111) plane was observed at higher temperatures, while at lower temperatures layer-by-layer crystallization occurred along the (001) plane. Defect formation was found to be initiated by 5-membered rings created at the interfaces which gave rise to interstitials and {111} stacking faults in the melt and SPE growth, respectively.

## 1. はじめに

最近世界中で話題となったコンピューターの2000年問題は、現代社会がコンピューターに如何に大きく依存しているかを如実に物語っている。そのコンピューターを支える基盤材料はシリコン (Si) で、ウエハ状の単結晶 Si 基板の上に作製された集積回路がコンピューターのハード部分を構成している。単結晶 Si 基板の殆どは融液 Si からの結晶成長、特に融液からの結晶引き上げ (チョクラルスキー法) により作られているが、集積回路素子の微細化にともない単結晶 Si 中の格子欠陥密度の低減化に対する要求がますます厳しいものになってきつつある。格子欠陥の構造や密度は結晶引き上げ時の種々の条件に強く依存することが経験的に知られているが、その形成メカニズムについては殆ど理解されていない。また、集積回路の作製において、イオン注入が不可欠なプロセス工程となっているが、Si 結晶はこのイオン注入により損傷や非晶質化を受ける。そのため、熱処理による損傷回復や再結晶化が必要となるが、そのメカニズムについても不明な点が多い。特に、非晶質 Si と結晶 Si の界面で起こる固相エピタキシャル成長 (Solid Phase Epitaxy, SPE) は3次元集積回路作製のための重要な要素過程のひとつである。

Molecular dynamics simulations of crystal growth of Si. By Teruaki Motooka (Kyushu University).

\*九州大学大学院工学研究科

本稿では、分子動力学 (Molecular Dynamics, MD) シミュレーションを用いて Si 原子の運動を追跡することにより、Si 融液及び非晶質 Si からの結晶成長を計算機の中で模擬的に行う方法について述べる。まず、X, Y, Z-軸を稜とする直方体の箱を考え、この中に原子を入れる。この箱を MD セルと呼ぶことにする。MD セル中の単結晶 Si を融解して Si 融液を作成し、融液のミクロな構造を調べる。つぎに、MD セルに対して、Z-軸方向に温度勾配を与えることにより融液/結晶界面を作成し、定常状態における界面構造を調べる。さらに、MD セルを一定の速度で Z-軸方向に移動させることにより、融液からの結晶成長を誘起し、結晶面方位・引き上げ速度と成長過程の相関を調べる。SPE についても、非晶質 Si と結晶 Si を接続した MD セルを作成し、これを種々の温度で加熱することにより結晶成長過程を調べる。また、シミュレーションの結果と、最近可能になって来た高分解能電子顕微鏡による原子像観察結果との比較も行う。

## 2. 融液成長と固相成長

チョクラルスキー法では、石英るつぼの中に高純度多結晶 Si の塊を入れ、黒鉛製ヒータに電流を流すことにより加熱・融解し、得られた融液 Si に細い棒状の種結晶を入れ引き上げてゆく。このとき、ヒータの温度と引き上げ速度を上手にコントロールすることにより、直径が一定の円柱上の単結晶 Si が得られ、これをスライス・研磨して集積回路用の Si ウエハが作

られている<sup>1)</sup>。融液からの結晶成長の駆動力は、マクロには過冷却度  $\Delta T = T_m - T$  ( $T_m$ : 融点,  $T$ : 融液の温度) により決まる。すなわち,  $\Delta T$  が大きい融液ほど結晶化が起こり易い。過冷却状態にある融液ではどの部分からでも, 特に異物や石英るつぼの壁から勝手に結晶化が起こってしまう。従って, 結晶化の駆動力が引き上げ部分の固液界面のみに一様に働くようにすることが技術的な課題となる。このために, 結晶引き上げの現場では, ヒータ温度, 引き上げ速度, るつぼの回転等と結晶成長の相関について多くの経験則が積み重ねられている。しかしながら, 結晶引き上げ条件の設定は技術者の勘に頼る部分がまだ多く存在するのが現状で, 確固たる科学的知識に立脚した成長条件の最適化が強く望まれている。特に, 融液 Si と固相 Si 界面のマイクロ構造は実験的な解析が極めて困難で, 分子動力学による解析が有用である。

固相成長は, 融液成長が温度勾配下で進行する非平衡プロセスであるのとは異なり, 一様な加熱のもとで起こる熱平衡プロセスである。これは, 融液 Si が熱力学的平衡状態にあるのに対して, 非晶質 Si は準安定状態にあることによる。SPE は融液成長にくらべてはるかに低温 ( $\sim 600^\circ\text{C}$ ) で起こる結晶成長で, これまでに多くの研究がなされており, 結晶化の活性化エネルギーとして約 2.7 eV が得られている<sup>2)</sup>。最近ではイオンビーム照射により結晶化温度の更なる低下を可能にする Ion Beam Induced Epitaxial Crystallization (IBIEC) が注目されており, IBIEC における活性化エネルギーとして  $\sim 0.3$  eV が得られている<sup>3)</sup>。これは, イオンビーム照射により非晶質/結晶 Si 界面近傍に作られた欠陥が結晶化を促進することによるものと一般には考えられているが, その詳細については不明である。

### 3. 分子動力学計算

分子動力学法は, 時々刻々の原子配置を, 各原子の古典的運動方程式すなわち Newton 方程式を連立して解くことにより決定し, その原子系の振る舞いを調べる手法である。従って, まず原子に働く力  $F$  を求める必要がある。力  $F$  を正確に決めるためには, 原子中に存在する電子を含めた量子力学系のシュレーディンガー方程式を解く必要がある。しかしながら, 多電子系のシュレーディンガー方程式を正確に解くことは不可能で, 様々な近似法が必要となる。現在では, 分子の量子力学的計算技法として確立されている ab-initio 分子軌道法と, 固体の基底電子状態の計算法とし

て1960年代に Kohn と Sham により確立された密度汎関数法が, 最も信頼性の高い方法として知られている。これらはいずれも第一原理に基づく方法であるが, 粒子数が多くなると計算時間が膨大となり結晶成長のシミュレーションには不適である。本シミュレーションでは経験ポテンシャルではあるが非晶質および融液状態の Si も良く記述する<sup>4)</sup> Tersoff ポテンシャル<sup>5)</sup>を解析的に微分することにより  $F$  を求めた。

力が求まれば, 運動方程式を解いて原子の運動が追跡できるが, それで完了というわけにはいかない。現実の物質が示す性質, 例えば密度, 比熱, 粘性率等は温度・圧力等の環境条件に依存する。実験は通常, 温度と圧力が定まった条件下で行われるので, 分子動力学によるシミュレーションも同様の条件下で行うのが望ましい。温度や圧力は原子の運動に関する統計平均量として算出される。このような平均操作のことをアンサンブル (ensemble) 平均とよぶ。アンサンブルとは原子系の状態 (古典力学では各原子の位置と速度が与えられると系の一つの状態が定まる) の集合である。すなわち, 分子動力学を用いて時々刻々の原子の位置と速度を計算することによりアンサンブルを作ることができる。例えば, MD セルのサイズすなわち系の体積  $V$  と原子数  $N$  を一定として得られるアンサンブルを  $NVE$  アンサンブルあるいはミクロカノニカルアンサンブルとよぶ。ここで  $E$  は原子系の全エネルギー (= 運動エネルギー + ポテンシャルエネルギー) で時間によらない保存量 (運動の定数) である。すなわち,  $NVE$  アンサンブルでは全エネルギーが一定で, このような状況は原子系が外部と何の相互作用も持たない閉じた系であるときに実現される。一方, 温度が一定の系は, 外部とエネルギー交換が許されるときに実現される。外部系は原子系にくらべて十分大きくかつ温度  $T$  の熱平衡にあり熱浴と呼ばれる。この条件下で得られるのが  $NVT$  アンサンブルあるいはカノニカルアンサンブルである。温度と圧力が一定の系は, 熱浴とエネルギーのみならず運動量の交換も許されるときに実現され, 対応するアンサンブルは  $NPT$  アンサンブルとよばれる。本稿では  $NVT$  アンサンブルを用い, 原子数はその密度が融液 Si の実験値,  $2.58 \text{ g/cm}^3$  あるいは結晶 Si の値,  $2.33 \text{ g/cm}^3$  に一致するように設定した。温度のコントロールには原子系を熱浴に浸した状況を想定し,  $F$  にランダム力と摩擦力を追加した Langevin 方程式を利用した。境界条件は, X, Y 方向は周期条件, Z 方向は低温側の 2 原子層を固定, 高温側は自由表面とした。図 1 に結晶成長シミュ

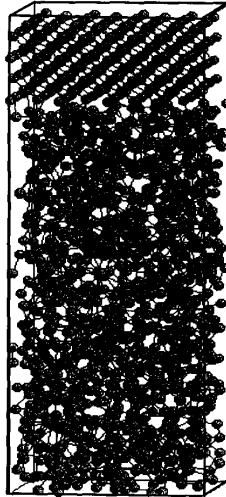


図1 結晶成長シミュレーションのためのMDセルの一例

レーションに用いたMDセルの一例を示す。

#### 4. 融液成長の分子動力学シミュレーション

##### 4.1 融液シリコンの構造

固体を加熱すると固体を構成する原子は、結晶格子位置を中心にして激しく振動するようになる。加熱温度が融点を越えると、固体は結晶状態を保持することが出来ず、原子が流動して液体状態をとるようになる。熱力学的には、融点を越える温度  $T$  では、原子が規則的に配列してポテンシャルエネルギーを下げるよりは、ランダムな配置をとってエントロピーを上げる方が系の自由エネルギーをより下げることができることによる。融点は固相（固体状態）の自由エネルギーと液相（液体状態）のそれが一致する温度で、融点では固液両相が共存し得る。実験的には1気圧下でのSiの融点は1683 K (1410°C) で融解に伴い約10%の密度上昇が起こることが知られているが、シミュレーションによる再現には世界の誰も未だ成功していない。

図2は我々のシミュレーションで得られた固-液相転移の例を示す<sup>4)</sup>。ここでは少しごまかしをやっており、液相の計算にはSi融液の密度を与えるMDセルを用いるが、固相の計算は単結晶Siの密度に対応して約10%体積の大きなセルを用いて行っている。図からわかる様に融液側の最低温度と固体側の最高温度は一致していないが、ここでは暫定的に融液側の最低温度を融点とすると、約2700 Kとなり実験値に比べて非常に高い。しかしながら、図2から得られる融解潜熱および比熱は実験値と良い一致を示す。また、動径分布関数についても、図3に示すように実験との一致

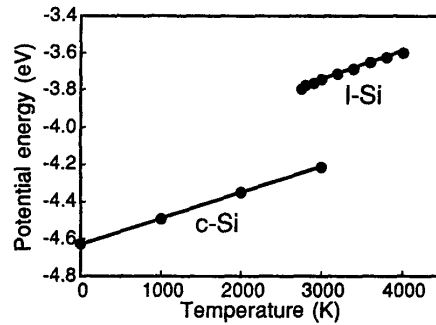


図2 Tersoffポテンシャルを用いた分子動力学シミュレーションにより得られた固-液相転移の例

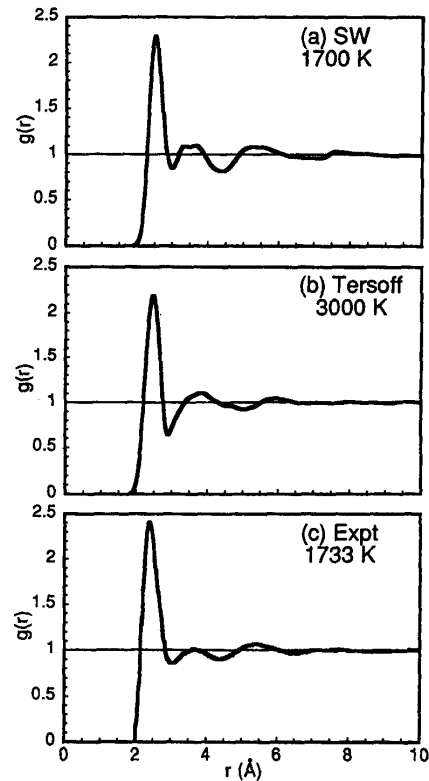


図3 融液シリコンの動径分布関数  $g(r)$  : (a)SWポテンシャルを用いて1700 Kで加熱した場合の計算値, (b)Tersoffポテンシャルを用いて3000 Kで加熱した場合の計算値, (c)1733 Kで加熱した場合の実験値

はよい<sup>5)</sup>。図中には、Siの融点をほぼ正しく再現するように作られた経験的ポテンシャルである Stillinger-Weberポテンシャルによる計算結果も示してある。

ところで、融液Siの構造は、Al融液に代表されるような液体金属とかなり異なることが知られている。その特徴は、ある原子のまわりの最近接原子の個数（ボンドの数）に反映される。この量を配位数とよぶが、実験的には動径分布関数からその平均値が求められ、融液Siは約6、液体金属は約12となる。これは、

液体金属では原子間力が等方的で面立方格子的な構造となるのに対して、融液 Si では結晶 Si における四面体的な結合性が未だ残っていることによるものと考えられている。

#### 4.2 融液/結晶界面構造

融液成長は融液 Si と固相 Si の界面（固液界面）で起こる。固液界面を分子動力学シミュレーションで行うためには、MD セルの Z-軸方向に温度勾配を与えて定常状態を作ればよい。図 4 は、 $21 \times 21 \times 42 \text{ \AA}^3$  (1024原子) の MD セルを 3 種類の温度勾配の熱浴に浸して、融液/固相(001)界面を作り定常状態において 10 ps 間の原子位置を(110)面に投影したものである。いずれの温度勾配に対しても、固液界面は $\sim 2300 \text{ K}$ の温度領域にあり、(111)ファセットを含むラフな形状を示す。前節で得られた融点 ( $\sim 2700 \text{ K}$ ) に較べてかなり低い温度のところから固液界面が現れる理由は、今の場合系が非一様で融液に接する固体部分はバルクの融点より低い温度で融解し得ることによるものと考えられる。図 5 は、同一条件における融液/固相(111)界面の構造を示す。固液界面は、(001)界面の場合と同様 $\sim 2300 \text{ K}$ の温度領域にあるが、(111)界面形状は(001)のそれと異なり、原子的に平坦である。また、両界面ともに、温度勾配による質的な差異はみられない。これらの計算結果から、Si の固液界面のミ

クロな構造に対して、以下のような物理的描像が得られる。固相側界面原子は固相側の 3 個の原子と結合し、1 本のダングリングボンドを融液側に出し、融液側の原子は{111}ファセット面上を比較的自由に動き回ることにより安定化する。すなわち、固液界面は固相側でポテンシャルエネルギーを下げ、融液側でエントロピーを稼ぐことにより安定化しているものと考えられる。

#### 4.3 結晶成長および欠陥形成過程

融液からの結晶成長は、上で得られた定常状態にある固液界面を冷却することにより起こる。図 6 は温度勾配を  $15 \text{ K/\AA}$  に固定して、 $10 \text{ m/s}$  の速度で MD セルを[001]および[111]方向に引き上げたときの結晶成長過程を示す。引き上げ開始状態は、完全結晶状態を図に示す温度勾配で 200 ps 間保持して加熱した後で得られたもので、両方向とも固液界面は温度が $\sim 2300 \text{ K}$ の位置に見られる。なお、図は 4 ps 間すなわち 2000 ステップ分の Si 原子の位置を、(110)面に投影して得られたものである。いずれの場合においても、前節で示した様に固液界面は(111)面となる傾向が見られる。すなわち、[001]引き上げでは、界面はファセット状に、[111]引き上げでは、界面は平坦となる傾向がある。

以上に述べた界面構造を反映して、[001] 引き上げ

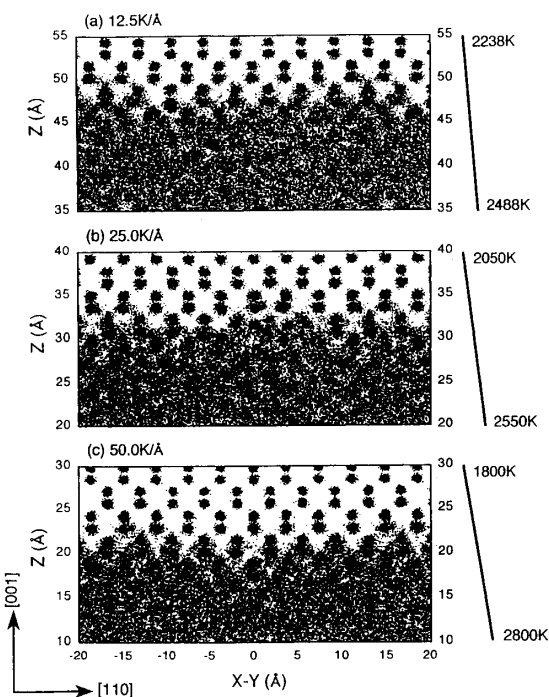


図 4 融液/固相(001)界面構造：温度勾配(a)12.5 K/Å, (b)25.0 K/Å, (c)50.0 K/Å

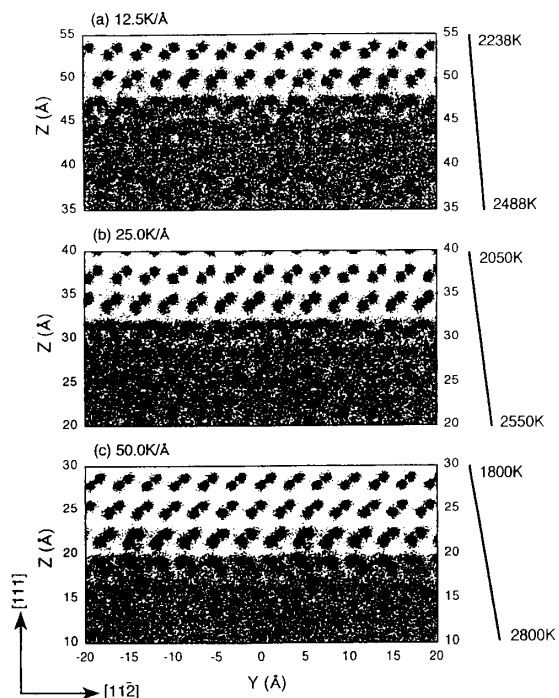


図 5 融液/固相(111)界面構造：温度勾配(a)12.5 K/Å, (b)25.0 K/Å, (c)50.0 K/Å

では融液側の原子が[111]ファセットにとまらうキンク位置へのSi原子の拡散により結晶成長が律速され、一方、[111]引き上げでは、 $\sim 270$  psにおける投影図に見られるようにダブルレイヤーの2次元核がまず形成され、それが横方向に伸びて成長が進む。すなわち、[111]方向の結晶成長はダブルステップのlayer-by-layer成長となる。この様子は、 $\sim 540$  psにおける投影図に明らかに見られる。従って、[111]方向引き上げによる結晶化の進行は、2次元核形成が前駆過程と

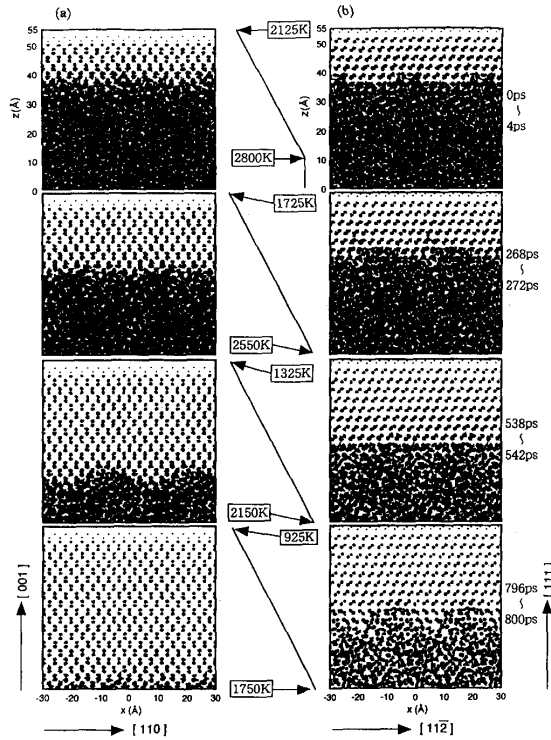


図6 結晶成長過程：(a)[001]引き上げ、(b)[111]引き上げ

して必要となるので、[001]方向にくらべて遅くなる。実際、図6に見られるように、[111]引き上げではMDセルの中程ですでにガラス状態に固化していることがわかる。図7、8はそれぞれ[001]、[111]方向引き上げによる結晶化過程の引き上げ速度依存性を示したもので、急激な冷却により結晶化が起こる前に固化してしまう様子が見られる。

シミュレーションで得られた[111]方向の結晶成長の様子は図9に示すように高分解能電子顕微鏡による観察結果<sup>10)</sup>にも見られている。図9中には、比較のためにダブルステップlayer-by-layer成長の分子動力学シミュレーションの結果を抜き出したものも示してある。電子顕微鏡とシミュレーションの結果が良く似ていることが分かったが、実験で観察された原子像が試料の厚さ方向に含まれた多く(100層程度)の原子の位置を1/30秒間にわたって平均したものであることに注意する必要がある。一方、シミュレーションでは10 ps程度の時間にわたって、厚さ方向に約4原子層の原子位置を(110)面に投影したものをしているにすぎない。

ところで、欠陥生成過程の解析は以下の理由で極めて困難である。例えば、結晶Si中の原子空孔の生成エネルギーとして得られている64原子のセルによる典型的な第一原理計算の値約4 eV<sup>11)</sup>を用いると、Siの融点(1683 K)近傍で結晶Si中に原子空孔が生成される確率は $\exp(-4 \text{ eV}/1683 \text{ K}) \approx 10^{-12}$ となり、たとえ百万個の原子でシミュレーションを実行しても原子空孔の生成を見るチャンスは極めて少ないことになる。(第一原理計算では、エントロピーの効果は考慮されていないが、Ungar等<sup>12)</sup>は216個の原子を用いて Tersoff ポテンシャルによりエントロピーを考慮に入

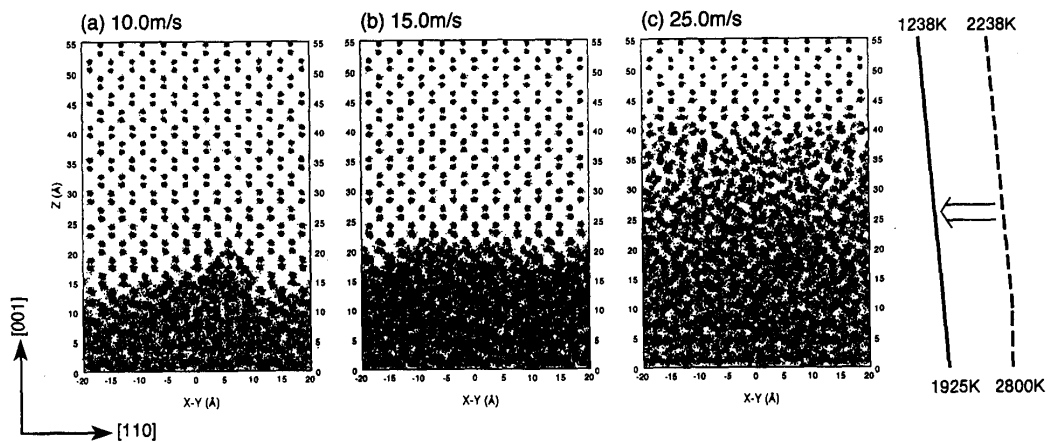


図7 [001]方向の引き上げによる結晶成長過程：(a)10.0 m/s、(b)15.0 m/s、(c)25.0 m/s (温度勾配12.5 K/Å)

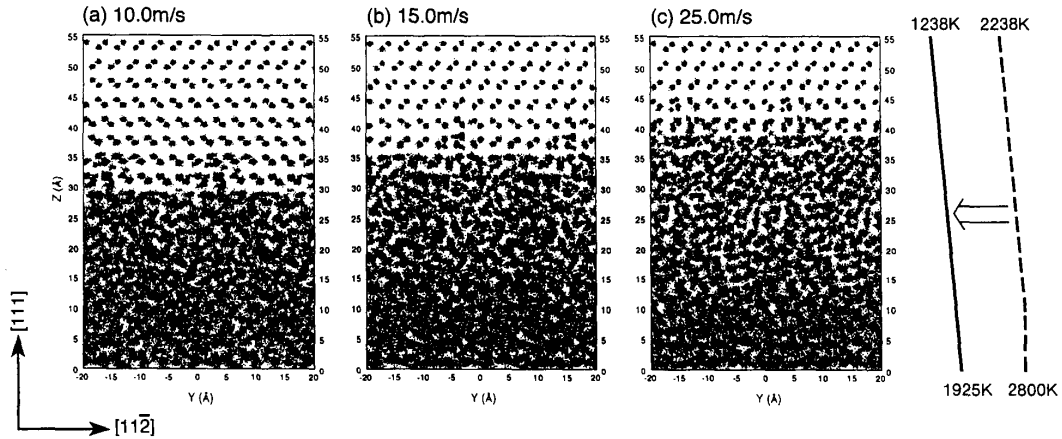


図8 [111]方向の引き上げによる結晶成長過程：(a)10.0 m/s, (b)15.0 m/s, (c)25.0 m/s (温度勾配12.5 K/Å)

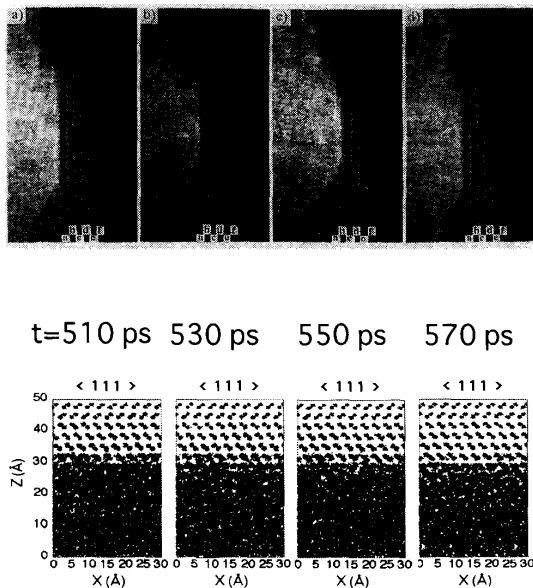


図9 高分解能電子顕微鏡による固液界面の観察例と[111]結晶引き上げ分子動力学シミュレーションの例

れた計算を実行しており、2000 Kにおける空孔の生成確率として約 $10^{-7}$ を得ている.)

図10は約10,000個の原子から成るMDセルを温度勾配15 K/Å, 15 m/sの速度で引き上げたときの結晶成長過程を示し、欠陥形成が見られた極めて稀な例である。初期状態(a)は、密度を結晶Siの値に設定した完全結晶を600 ps間加熱することにより得られたものである。固液界面は{111}ファセットを作って安定化する傾向があり、図(b), (c)中に矢印で示す様に、{111}界面における結晶化が結晶成長の律速過程となっている。この例では、19.6 ps引き上げ後における状態(d)の丸で囲んだ部分に示す様な欠陥が形成され

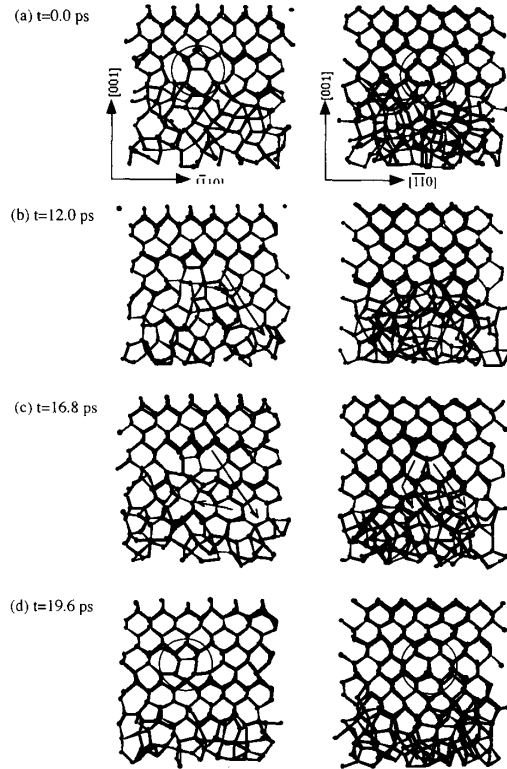


図10 [001]結晶引き上げ：(a)初期状態, (b)12 ps, (c)16.8 ps, (d)19.6 ps 引き上げ後

ている。この欠陥部分の拡大図を図11に示す。得られた欠陥はトポジカルには<110> split 格子間原子と同等である。この様な結果形成の起源は図(a)中の丸で囲んだ部分に示す5輪環を含む構造となっている。

### 5. 固相成長の分子動力学シミュレーション

固相エピタキシャル成長過程のシミュレーションは、融解・急冷により得られた非晶質Siの直方体ブ

ロック上に8層の(001)結晶Siを接続し十分に緩和させた後、種々の温度で加熱することにより行った<sup>13)</sup>。図12はシミュレーションで得られた[001]結晶成長速度のアレニウスプロットを示す。活性化エネルギーは1550 K以下の低温域では約2.6 eVとなり、熱的SPEの実験値と良い一致を示している。一方、高温域では約1.2 eVとなる。シミュレーションに基づく非晶質/結晶Si界面の観察から、図13に模式的に示すように低温域では(001)面、高温域では(111)面に沿う結晶化が律速過程となっており、これが活性化エネルギーの違いを与える理由と考えられる。すなわち、低温域では(001)面における2次元核形成が、高温域では(111)面におけるSiの拡散が活性化エネルギーを決めているものと考えられる。Si(111)表面自己拡散の活性化エネルギーとしては、 $\sim 0.2\text{--}2\text{ eV}$ の値が報告されているが<sup>14,15)</sup>、本シミュレーションで得られた値との比較には注意が必要である。実際 Tersoff ポテンシャルは実験に比べてはるかに高い融点を与えるので、高温域の信頼性は保証されない。高温域ではパラメータの再設定等の操作が必要となろう。図14は固相エピタキ

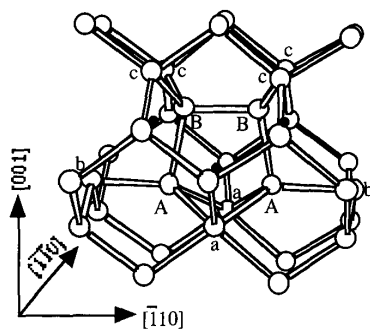


図11 欠陥構造

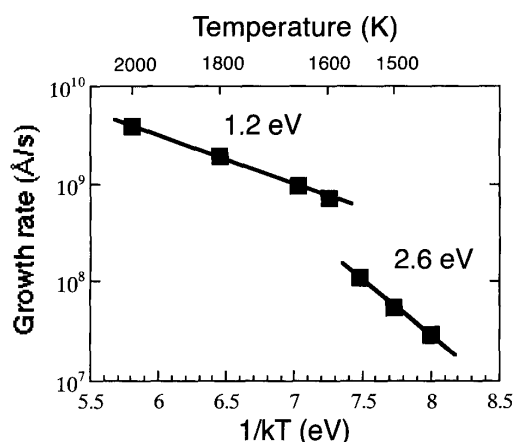


図12 固相エピタキシャル成長過程のアレニウスプロット

シャル成長中の欠陥形成過程の一例で、融液成長におけると同様、界面に生成された5輪環構造が積層欠陥形成の源となっていることがわかる<sup>16)</sup>。

## 6. おわりに

本研究は結晶成長過程をマイクロなスケールで理解し、高品質結晶成長のための最適条件の確立に資することを目的として遂行された。分子動力学シミュレーションによる可視化から得られた、融液からの結晶成長の原子過程は、最近の高分解能透過電子顕微鏡“その場”観察の結果と良く一致することを示した。これらの結果は、分子動力学シミュレーションが時間的・空間的に極めて微小な領域に限られたものであるにもかかわらず、結晶成長メカニズムの解析には十分有用であることを示唆しており、その意義は大きい。特に、シミュレーションで得られた融液からの結晶成長中に形成される欠陥は、固液界面における結晶成長様式の乱れに起因するもので、inhomogeneousな欠陥生成過程であることを強調しておきたい。従来、結晶Si中の欠陥として原子空孔等の生成エネルギーの計算がなされて来たが、これらはhomogeneousな欠陥生成を仮定している。融液成長中のGrown-in欠陥生成過程の解析には固液界面の存在によるinhomogeneousな欠陥生成過程の研究が今後重要になるものと思われる。

上に述べたように、結晶成長や欠陥生成の要素的(マイクロ)過程は、分子動力学シミュレーションにより有用な解析が可能である。これに対して、実際の結晶引き上げで制御されている重要なパラメータは、マ

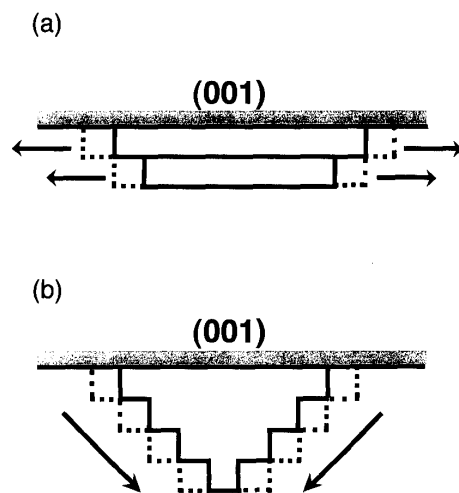


図13 固相エピタキシャル成長律速過程の模式図：(a)低温域、(b)高温域

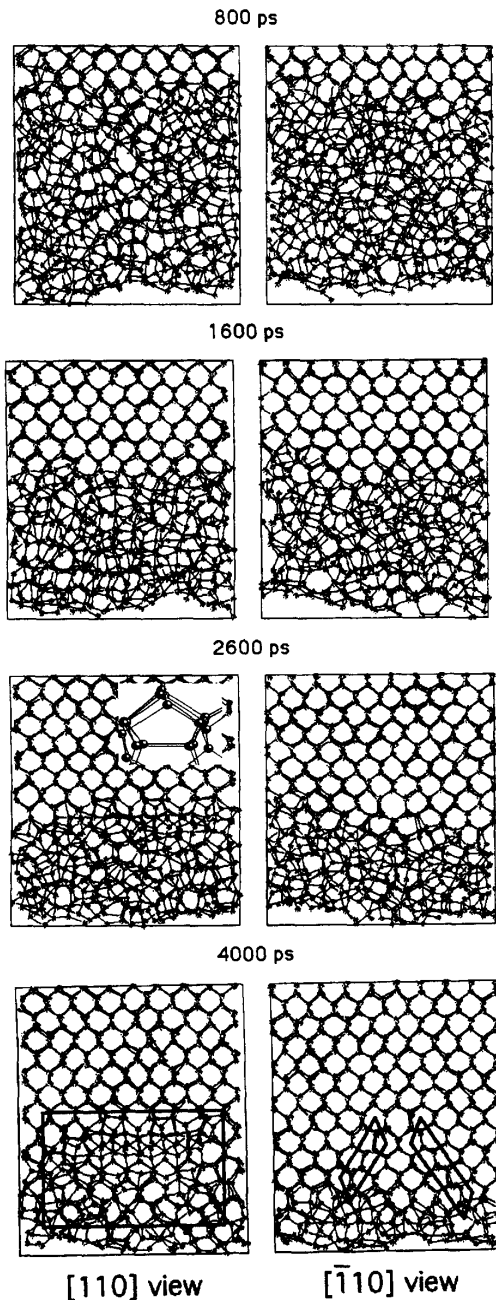


図14 固相エピタキシャル成長における欠陥形成過程の例

クロなスケールでの引き上げ速度 ( $\sim 1$  mm/min) や固液界面における温度勾配 ( $\sim 10$  K/mm) である。一方, 分子動力学シミュレーションにおけるこれらの量の典型的な値は, それぞれ, 10 m/s, 15 K/Å で約7桁の違いがある。このスケールの違いを乗り越えて, ミクロとマクロの連関を明らかにすることが, 今後に残された大きな課題である。

最後に, 本研究は石丸学 (九州大学大学院工学研究科助手), 隈元 崇 (現株式会社インテル), 吉田 興 (現株式会社全日空), 宗藤伸治 (現株式会社住友金属工業), 西平 健 (九州大学大学院修士課程2年) 君等の協力により遂行されたもので, ここに謝意を表したい。

#### 参 考 文 献

- 1) 阿部孝夫: シリコン—結晶成長とウェーハ加工, 倍風館 (1994)
- 2) G. L. Olson and J. A. Roth: *Mat. Sci. Rep.* 3, 1 (1988)
- 3) A. Kinomura, J. S. Williams and K. Fujii: Mass Effects on regrowth rates and activation energies of solid-phase epitaxy induced by ion beams in silicon, *Phys. Rev.* **B59**, 15214 (1999)
- 4) T. Motooka: Model for amorphization processes in ion-implanted Si, *Phys. Rev.* **B49**, 16367 (1994)
- 5) T. Motooka: Atomistic simulations of amorphization processes in ion implanted Si: Roles of defects during amorphization, relaxation, and crystallization, *Thin Solid Films* 272, 235 (1996)
- 6) M. Ishimaru, K. Yoshida and T. Motooka: Application of empirical interatomic potentials to liquid Si, *Phys. Rev.* **B53**, 7176 (1996)
- 7) M. Ishimaru, K. Yoshida, T. Kumamoto and T. Motooka: Molecular-dynamics study on atomistic structures of liquid silicon, *Phys. Rev.* **B54**, 4638 (1996)
- 8) T. Motooka, S. Harada and M. Ishimaru: Homogeneous amorphization in high-energy ion implanted Si, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2980/2981 (1997)
- 9) J. Tersoff: Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties, *Phys. Rev.* **B38**, 9902 (1988)
- 10) 大嶋隆一郎, 堀 史説, 上野武夫, 矢口紀恵: シリコンの融解-凝固過程の電子顕微鏡その場観察, *日本結晶成長学会誌*, 25-5, 412 (1998)
- 11) 例えば A. Dal Pino, A. M. Rappe and J. D. Joannopoulos, *Phys. Rev.* **B47**, 12554 (1993)
- 12) P. J. Ungar, T. Halicioglu and W. A. Tiller, *Phys. Rev.* **B50**, 7344 (1994)
- 13) T. Motooka, K. Nisihira, S. Munetoh, K. Moriguchi and A. Shintani: Molecular dynamics simulations of solid phase epitaxy of Si: Growth mechanisms, *Phys. Rev.* **B6**, 8537 (2000)
- 14) H. C. Abrink, R. M. Broudy and G. P. McCarthy: Surface Processes in the Growth of Silicon on (111) Silicon in Ultrahigh Vacuum, *J. Appl. Phys.* **39**, 4673 (1968)
- 15) R. A. Joyce, R. R. Bradley and G. R. Booker: A Study of Nucleation in Chemically Grown Epitaxial Silicon Films using Molecular Beam Techniques, *Phil. Mag.* **15**, 1167 (1967)
- 16) T. Motooka, K. Nisihira, S. Munetoh, K. Moriguchi and A. Shintani: Molecular dynamics simulations of solid phase epitaxy of Si: Growth mechanism and defect formation, *Mat. Res. Symp. Proc.* (2000), in press