

氏名	前田 貴弘
授与した学位	博士
専攻分野の名称	工学
学位授与番号	博甲第103号
学位授与の日付	平成27年3月24日
学位論文の題目	第一原理計算による Si および Ge 結晶中の点欠陥と複合体欠陥に関する研究
学位審査委員会	主査 末岡浩治 副査 伊藤信之 副査 忻 欣 副査 福田忠生

学位論文内容の要旨

現在、電子デバイス用の基板として Si 単結晶ウェーハが用いられている。デバイス性能のさらなる向上を目的として、Si ウェーハ表面近傍のデバイス形成領域直下に炭素 (C) などをイオン注入する近接ゲッタリング技術が検討されている。このイオン注入によって形成される微小欠陥は汚染金属に対するゲッタリング効果を有し、イメージセンサの金属汚染起因の白キズを減少させる。また、ドーパントであるヒ素 (As) などのイオン注入により形成される微小欠陥は、逆にイメージセンサの白キズとなる。このように微小欠陥がデバイス性能に影響を与えることから、イオン注入に伴い形成される微小欠陥の構造やそれによるゲッタリング機構、デバイス特性劣化機構などを解明することが強く望まれている。

次に、半導体デバイスの今後の技術動向について注目する。半導体デバイスの技術ロードマップである ITRS (International Technology Roadmap for Semiconductors) によると、加工線幅 20 nm 以降は微細化がきわめて困難となり、かつ微細化によるコストダウンが期待できなくなる。そのため、今後は平面的なデバイス構造を大きく見直し、3次元技術を駆使したデバイスに移行すると予想されている。このような微細化や3次元技術に並行して、材料によるデバイス性能向上も検討されている。具体的には、チャンネル部における歪み Si 技術や絶縁膜における High-k/Metal-gate 技術などが既に実用化されている。さらに最近では、デバイス性能を飛躍的に向上させる技術として、キャリア移動度が高い Ge や化合物半導体を使用したデバイスの基礎研究が多数報告されている。実用上は、既に確立された Si デバイス製造プロセスのプラットフォームをできるだけ活用できることが望ましく、Si と同じ IV 族半導体である Ge を Si ウェーハ上で用いる「Ge/Si デバイス」が最も実現性が高いと考えられている。しかし、Ge に関する研究は Si と比較して圧倒的に少ないのが現状であり、Ge/Si 構造を実用するためには Si と Ge 結晶における不純物の安定性と拡散機構について、総括的なデータベースの構築が強く望まれている。さらに、Ge/Si デバイスを実用上で急峻かつ清浄な界面を得ることが重要

であり、このような観点から、点欠陥と汚染金属原子の安定性を把握することが重要課題となっている。

以上の技術背景の元で、本研究では電子論的にミクロな現象の考察が可能である第一原理計算を用い (1) イオン注入により Si 中に導入された微小欠陥の構造、微小欠陥によるゲッターリング機構とデバイス劣化機構、(2) Si と Ge 結晶中の不純物の安定位置と拡散機構、(3) Ge/Si 構造の急峻性劣化に対する点欠陥の影響、および Ge/Si 構造中の汚染金属の偏析位置について解明することを目的とした。以下に各章の概要を簡単に述べる。

第 1 章は序論であり、Si ウェーハに関する製造技術や高品位化技術、半導体デバイス技術の動向について説明している。さらに、C や As イオン注入に伴い Si 結晶中に導入される微小欠陥とそれに付随する現象や Ge の実用に関する技術課題を述べている。最後に本論文の目的と構成を述べている。

第 2 章では、本研究で解析に使用した密度汎関数法を基礎とした第一原理計算法について概説している。さらに、点欠陥や不純物、それらの複合体などを含む Si や Ge 結晶について、高精度計算を実現するために工夫した計算テクニックについても述べている。

第 3 章では、イメージセンサの白キズに注目し、C や As イオン注入に伴い Si ウェーハ中に導入される微小欠陥の構造やそれによるゲッターリング機構、デバイス劣化機構に関する第一原理解析の結果を述べている。C イオン注入により原子空孔 (V) と O からなる VmOn 複合体が容易に形成し、これらは Al, Fe, Ni, Cu といった代表的な汚染金属に対して有効なゲッターリングサイトとなることを示している。さらに、As イオン注入により安定な AsV, CVAs や CVAsOn 複合体が形成し、これらが白キズ欠陥の実体であると結論している。最後に、白キズ欠陥の低減方法を 2 つ提案している。

第 4 章では、Si と Ge 単結晶中の不純物原子の安定位置および拡散機構に関する第一原理解析の結果を述べている。得られた計算結果を既存の実験と比較しつつ、不純物の安定位置に関して、周期律表の大部分を網羅する系統的なデータベースを作成している。さらに Si と Ge 結晶中の不純物について異なる拡散機構を提案し、実験により得られている拡散障壁の定量的な説明に成功している。

第 5 章では、Ge/Si 構造中での V や不純物原子の安定位置に関する第一原理解析の結果を述べている。界面近傍において、Si 結晶中の V は容易に Ge 層側へ拡散できることを示し、実験で観測されている Ge 原子の Si 層への拡散をこの機構で説明している。さらに、急峻な界面を維持する方法を 2 つ提案している。また、Ge/Si 構造において不純物原子が偏析する場所は、格子歪みが存在する界面近傍領域および Ge 表面であることも示している。さらにこの結果から、デバイス活性層の考え方によって、Ge/Si デバイスにおける金属汚染の対応策を 2 つ挙げている。

第 6 章では、本研究を総括するとともに、今後の課題を述べている。

主業績

No.1	
論文題目	Density functional theory calculations of stability and diffusion mechanisms of impurity atoms in Ge crystals
著者名	Takahiro Maeta and Koji Sueoka
発表誌名	Journal of Applied Physics, 116, 073505 (2014), 9 pages.

副業績

No.1	
論文題目	微小欠陥による金属不純物のゲッターリングに関する第一原理解析
著者名	前田貴弘, 末岡浩治, 泉妻宏治
発表誌名	シリコンテクノロジー, 162, 19 (2013), 5 pages.
No.2	
論文題目	First-principles calculation for behavior of metal impurities in Ge (100) / Si (100)
著者名	Takahiro Maeta and Koji Sueoka
発表誌名	Materials Science Forum, 725, 243 (2012), 4 pages.

論文審査結果の要旨

電子デバイス性能のさらなる向上を目的として、Si ウェーハ表面近傍のデバイス形成領域直下に炭素 (C) などをイオン注入する近接ゲッタリング技術が検討されている。このイオン注入によって形成される微小欠陥について、その構造やゲッタリング機構、デバイス特性劣化機構などを解明することが強く望まれている。

また、電子デバイスの技術動向において、キャリア移動度が大きい Ge を使用した「Ge/Si デバイス」が検討されている。しかし、Ge に関する研究は Si と比較して圧倒的に少ないのが現状であり、Ge/Si 構造を実用するためには Si と Ge 結晶における不純物の安定性と拡散機構について、総括的なデータベースの構築が強く望まれている。さらに、Ge/Si デバイスの性能向上のためには、その界面は急峻かつ清浄な必要がある。そのため、Ge/Si 構造における点欠陥と汚染金属原子の安定性を把握することが重要課題となっている。

本論文では (1) イオン注入により Si 中に導入された微小欠陥の構造、ゲッタリング機構とデバイス劣化機構、(2) Si と Ge 結晶中の不純物の安定位置と拡散機構、(3) Ge/Si 構造の急峻性劣化に対する点欠陥の影響および Ge/Si 構造中の汚染金属の偏析位置、を明らかにすることを目的とした第一原理計算を行っている。得られた主要な結果を以下に要約する。

1. イメージセンサの白キズに注目し、C や As イオン注入に伴い Si ウェーハ中に導入される微小欠陥の構造やゲッタリング機構、デバイス劣化機構に関する第一原理解析を行った。As イオン注入では原子空孔 (V) を含む安定な複合体である AsV, CVAs や CVAsOn が形成し、バンドギャップ中に欠陥準位を形成することから、これらが白キズの実体であると結論した。
2. Si と Ge 単結晶中の不純物原子の安定位置および拡散機構に関する第一原理解析を行った。得られた計算結果を既存の実験と比較しつつ、不純物の安定位置に関して、周期律表の大部分を網羅する系統的なデータベースを作成した。さらに Si と Ge 結晶中の不純物について異なる拡散機構を提案し、拡散障壁エネルギーの実験値を定量的に説明することに成功した。
3. Ge/Si 構造中での V や不純物原子の安定位置に関する第一原理解析を行った。その結果、Ge/Si 界面近傍において Si 結晶中の V は容易に Ge 層側へ拡散できることを示し、実験で観測されている Ge 原子の Si 層への拡散をこの機構で説明した。

以上の結果より、本論文の内容は、学術的、工学的価値が高いものと判断し、本学位論文審査委員会は博士 (工学) の学位論文に値するものと認める。