

S 原子ペアがピンングでショットキー障壁を消滅させる機構

Schottky barrier elimination mechanism by pinning at S-pair in Si

(株) 東芝研開セ LSI 基盤技術ラボ: ○加藤 弘一、丸亀孝生、西義史、三谷 祐一郎

Advanced LSI Tech. Lab., Toshiba R & D Center: ○K. Kato, T. Marukame, Y. Nishi, and Y. Mitani

E-mail: kato @arl.rdc.toshiba.co.jp

半導体電子デバイスの低消費電力化によるエコ社会の実現が望まれている。素子の微細化を進めるとスケーリング則により金属・半導体の接合の寄生抵抗成分が最も大きくなることが予測されている。[1]我々は、n 型半導体においては S 原子をドーピングすることにより NiSi/Si 接合のショットキー障壁がほぼ消え、接合抵抗がほぼゼロになることを実験的、理論的にも明らかにしてきた。また、この機能は S 原子が非結合ペアとなることで発現されると予言してきた。[2]

一方、浅い準位をつくる III 族、V 族不純物原子は高濃度にすることによって金属化することが知られている。S 原子も高濃度化によって金属化することも分かってきたが、金属化がショットキー障壁消滅の直接の原因でないことも分かってきた。[3]前回では、S 原子ペアの局所状態密度の解析から、これがない場合に比べて 2 eV 程度深い方向へシフトすることを報告した。電荷の移動によるシフトでは半導体ギャップ以上のシフトがあり得ないことから、局所的な状態密度の大きなシフトが金属に接合した半導体全体の状態密度シフトに大きく影響して障壁シフトが起きることが分かってきた。

今回は改めて図 1 のように NiSi/Si 接合から少し離れた Si 中で S 原子ペアを置換位置に配置し、MIGS と S 原子ペアの電子状態が区別できる状態で S 原子による周辺の電子構造への影響を詳細に検討した。図 2(a) に示すように隣接 Si 原子での局所状態密度の変化はこの影響で 1eV 程度のシフトしかないが、図 2(b) に示すように S 原子の局所状態密度は S 原子がない場合に比べて 2eV 程度も深い方向へシフトし、S 原子が状態密度シフトの起源であることを示している。この時のシフトはギャップ以上の変化であり、このシフトはピンングによるものと分かってきた。また、図 2(b) の S 原子によって新たに現れた状態密度のピークを破線で囲んで示すが、これに対応したフェルミレベルより -2.0 から -2.5 eV までの電子密度分布と -4. から 5 -5.0 eV までの電子密度分布を図 3 (a)、(b) にそれぞれ示す。どちらの電子分布にも S 原子のうち SP2 混成軌道に関与しない Pz 軌道成分が見られる。本来 Pz 軌道は Si-DB と同様に本来高い準位位置にあるが、各電子状態ともバルクシリコンのかかなり深い位置の価電子軌道と hybridize している。一般的には、軌道間の結合によって高い準位の軌道から低い準位の軌道に電子電荷が移動する。ここでは Pz 軌道は深い準位との結合となるため、電荷移動は空間的にはあまり広がらないが、広いエネルギー範囲にわたり S 原子からシリコン側へ電荷移動が起きている。このため、S 原子から Si 価電子側に多くの電子電荷移動があり、これによって S 原子のフェルミ準位が急激に下がり、軌道のピンングが起きて、結果として巨大障壁シフトが起きているのだと分かってきた。さらに、これを検証するため、当日はどのように実験で検証できるかも議論したい。

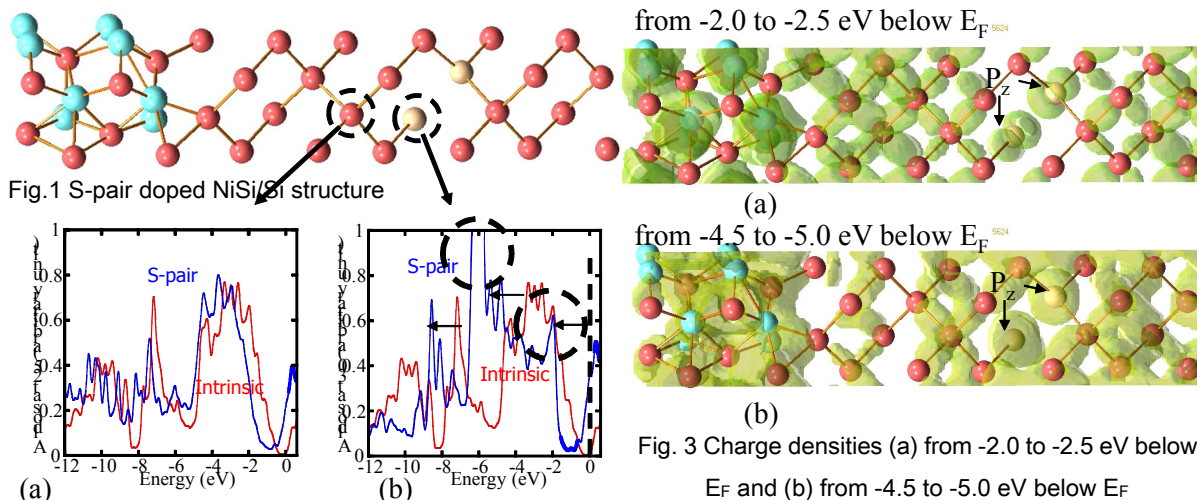


Fig.2 Atomic local densities of states (a) at the neighboring Si and (b) at S

[1]Y.Nishi et al., PRB84,115323(2011) [2]K.Kato et al., ICPS-31(2012) [2]加藤他春応物 2013 28p-G9-7