

イオン注入により形成される空孔型欠陥に関する第一原理解析

First-Principles Analysis on Vacancy-Type Defects Introduced by Ion Implantation

岡山県立大学大学院情報系工学研究科¹, グローバルウェーハズ・ジャパン株式会社²○前田 貴弘^{1,2}, 末岡 浩治¹, 泉妻 宏治²Okayama Pref. Univ., Dept. of System Engineering¹, GlobalWafers Japan Co., Ltd.²○Takahiro Maeta^{1,2}, Koji Sueoka¹, Koji Izunome²

E-mail: Takahiro_Maeta@sas-globalwafers.co.jp

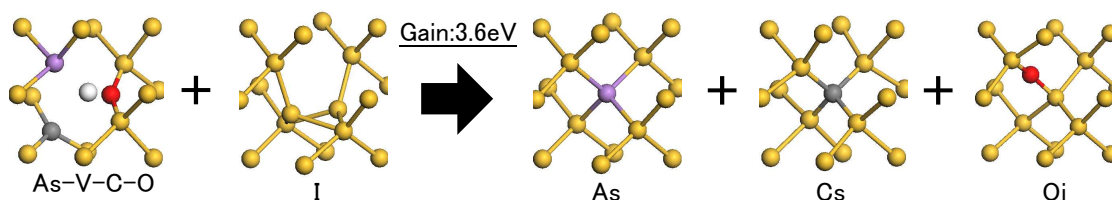
イメージセンサーデバイスにおける課題の一つの「白キズ」の要因はいくつかあるが、その中で結晶欠陥は微量微小であるために、欠陥自体を観測することは困難である。しかし、画質低下の原因であるノイズやキズの対策には、微小欠陥の組成と形成メカニズムを解明する必要がある。

最近, As (砒素) のイオン注入により形成される結晶欠陥が高温 RTA 後も残留し, 白キズに影響を及ぼすことが示された^[1]。また, この残留欠陥は空孔型欠陥であり, RTA (酸素雰囲気) により CiOi 欠陥に変化をすることが示された。これらから, Si 結晶中の微量炭素が白キズに影響していると考えられ, そのメカニズムを第一原理計算法により解析した。

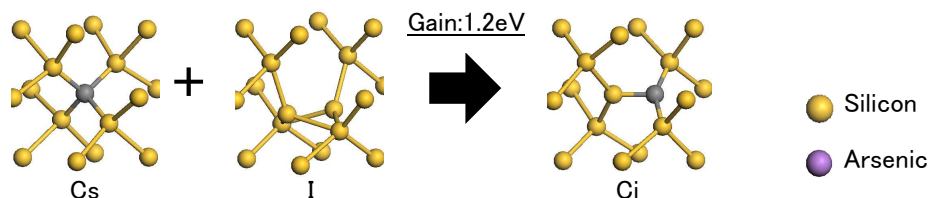
前述の空孔型欠陥が As-V(原子空孔)-C(炭素)-O(酸素)から成る複合体であると仮定した場合の CiOi 欠陥形成モデルを図 1 に示す。このモデルでは、はじめに、イオン注入や RTA (酸素雰囲気) により生成された格子間 Si(I)が複合体と結合することで、空孔型欠陥が消滅し、単独の置換 C(Cs)になる。その後、Cs は I により、格子間にキックアウトされ(Ci), 残存する Oi と結合することで CiOi 欠陥になる。エネルギー的にも反応後の状態の方が安定である。これらの解析から, As-V-C(-O)複合体が白キズ欠陥であると推定される。

[1] Satoshi Shibata, Akihiko Sagara, No.148 シリコンテクノロジー分科会研究集会, 2-5, 2012.

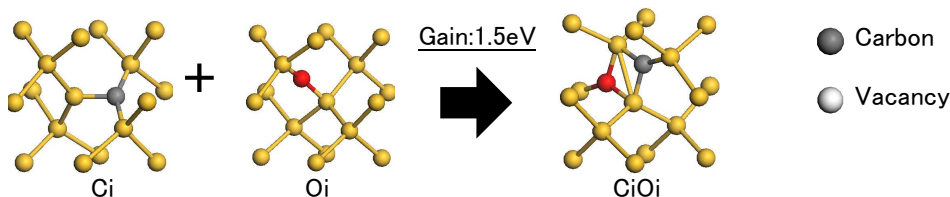
(a) 1st Process of reaction (annihilation complex)



(a) 2nd Process of reaction (Ci formation)



(a) 3rd Process of reaction (CiOi formation)



● Silicon
● Arsenic
● Oxygen
● Carbon
● Vacancy

Fig.1 The Model for Formation of CiOi Defect