29p-G16-17

Ge 結晶中のドーパントと不純物金属原子の相互作用に関する第一原理解析

First-Principles Analysis on Interaction of Dopant and Contamination Metal Atoms in Ge Crystals

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]
○大和龍紀 [1]，末岡浩治 [1]，前田貴弘 [2]
Okayama Pref. Univ.,Dept. of System Engineering[1], GlobalWafers Japan Co.,Ltd.[2]
○ Tatsunori Yamato[1], Koji Sueoka [1], Takahiro Maeta [2]
E-mail: jam_yusaiki@yahoo.co.jp

【緒言】近年，LSI デバイスの小型化，高性能化が急速に発展している．この技術動向において，Si よりもキャリア移動度が大きい Ge を Ge 薄膜/Si 基盤構造で利用する試みが始まっている．Si 中において，不純物の制御技術はほぼ確立されているが，Ge 中において，不純物の挙動に関する報告は少ない．また，これまでは Cu，Ni，Fe などがゲッタリングの対象であったが，デバイスの高性能化に伴い，Ti，Mo，Co，Ta，Pt などの新しい金属材料が用いられるようになり,これらもゲッタリングの対象となっている．以上の技術背景から，本研究では第四～第五周期の金属について，Ge 中のドーパントとの相互作用を第一原理計算法により解析した．

【計算方法】図 1 に示す 64 原子からなる Ge 結晶の計算セルにおいて，中心の Ge 原子 1 個をドーパント(Ga，Sb)と置換し，2 つの格子間サイト（T，H-site）あるいは Ge 原子の置換位置に金属原子を配置して構造最適化を行い，全エネルギーを求めた．さらに，ドーパントと金属の結合エネルギーE_b を計算することで，ドーパントと金属の相互作用について調べた．

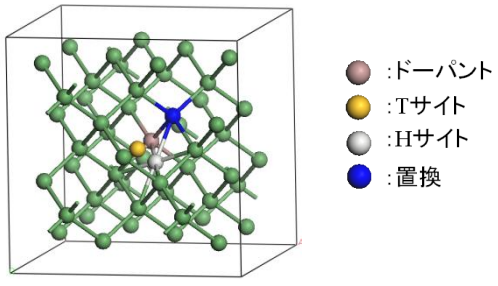

Fig.1 Metal positions in diamond structure.

【結果】各金属原子の最安定位置と結合エネルギーE_b を図 2 と 3 にそれぞれ示す．

p 型ドーパントの Ga では，3，4 族の金属原子は T②サイト（ドーパントの最近接の T サイト），5~7 族は T サイト，8~12 族は置換位置が最安定である．

一方，n 型ドーパントの Sb では，すべての金属原子は置換位置が最安定である．

また，3~5 族の金属原子は Ga と結合しやすく，Ag を除く 6~12 族の金属原子は Sb と結合しやすいこともわかった．

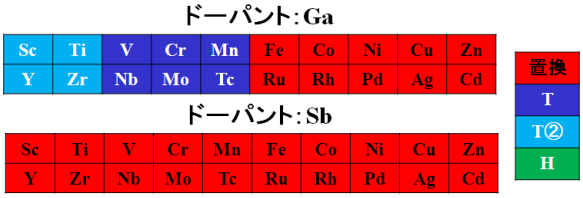

Fig.2 Most stable position of metal in Ge.

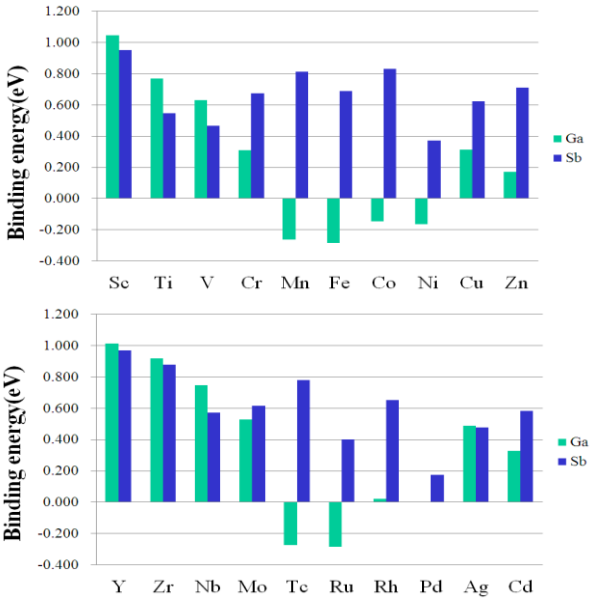

Fig.3 Calculated binding energy E_b of dopant and metal in Ge.

© 2013 年　応用物理学会