

金属/半導体界面における拡散過程の理論検討

Theoretical Study of Diffusion Processes at Metal/Semiconductor Interfaces

千葉大理 平松 智記、中山隆史

Chiba Univ., Tomoki Hiramatsu, Takashi Nakayama

E-mail:acaa3333@chiba-u.jp

金属/半導体界面はデバイスの基本構造であるが、いつまでも安定な形を保つ訳ではない。通電や加熱環境下では、界面両端の原子が相互拡散し、界面近傍の物性を変えてしまう。ナノスケールデバイスが検討されている現在、界面近傍でのこれら現象を深く理解する事は重要である。しかしこれまでの理論研究は拡散・混晶化の初期段階や最終形態の安定性を議論しているだけである。そこで本研究では、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を行い、界面から半導体中への原子拡散過程を検討し、これらの現象を引き起こす物理的要因を検討した。

図 1 は Al 原子が界面から Si 内に拡散する場合の断熱ポテンシャルである ($\text{Al}_5/\text{Si}_{13}\text{H}(111)$ 膜を用いて計算した)。バルク Si 中では Al は格子間の tetrahedral サイト(T-site)で安定となるので、拡散経路は界面からの T-site (T1, T2, T3, T4) を結んだものを用いた。界面から約 10 Å にある T4-site と 15 Å にある T6-site はほぼ同じ値を持つので、T4-site まで拡散するとバルク内の拡散が実現されていると考えて良い。また、拡散の始めと終わりの差は、Al が Al 界面及び Si 中にいる時のエネルギー差が決められている。次に、界面近傍でのポテンシャル変化をもたらす原因を分析した。図 2 の赤線は Al 原子が図 1 に示す T4-site に拡散した時の Al に関する状態の波動関数を、青線は清浄界面における MIGS(metal induced gap state)状態を示したものである。T4-site では、Al の状態は MIGS と弱く混成しているだけで、むしろ周りの Si へと広がった状態になっている。一方 MIGS は界面から 7~8 Å 侵入している。この結果から、ポテンシャルが界面近傍で変化するのは、拡散原子の電子状態が MIGS と混成しているためと考えられる。講演では、他の界面の結果も示し、原子拡散と MIGS との関係を議論したい。

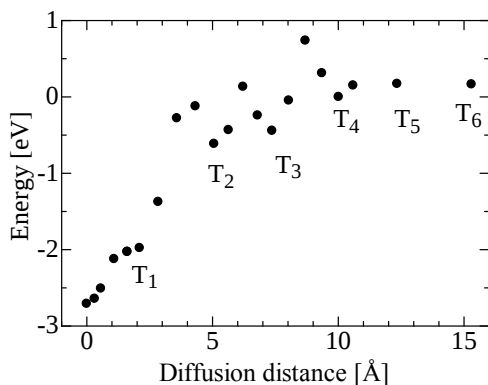


図 1. Al/Si 界面から Si 中への Al の拡散断熱ポテンシャルの界面からの距離依存性。

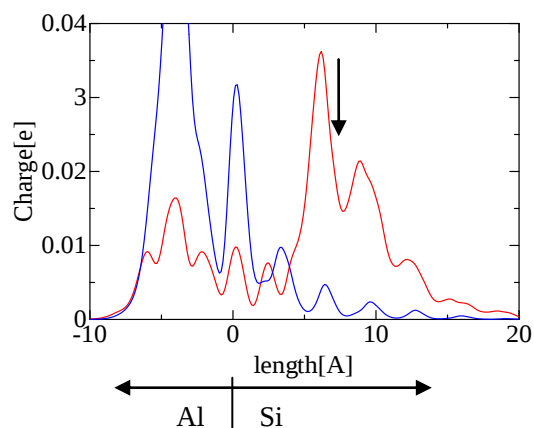


図 2. Al/Si 界面において、バンドギャップ中に現れる核酸 Al 起源の状態(赤)と、清浄界面での MIGS 状態(青)の積層方向での電荷分布。0 が界面位置、拡散 Al は矢印にいる。