

不純物・欠陥による S 原子ペアのショットキー障壁変調への影響

Effects of impurities and defects on Schottky barrier modulation by 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

エコ社会の実現のため、電子デバイスについてより一層の低消費電力化を目指している。半導体素子は微細化によって金属・半導体接合の寄生抵抗成分による電力消費が最も懸念されるようになってきている。このような状況で、我々は、VI 属原子をドーピングすると VI 属原子がペアで活性化することにより金属・半導体接合のショットキー障壁がほぼ消えることを理論から予測し、また、ショットキー障壁に加えて接合抵抗がほぼゼロになることも実験的に証明してきた。[1] また、ショットキー障壁の消滅には従来のドーパントとは異なる機構が働いていることも明らかにしている。[2]

一方、実際にこの実用化で懸念されるのは、その他の様々な不純物や欠陥などの阻害要因である。VI 属原子ではドナーの余った電子だけでなく、本来結合していないはずのローンペアの電子対の存在が障壁変調に大きく関わっている。このため、従来のドーパントなどの不純物が同時に存在すると、異なる障壁変調メカニズムが競合することになる。そこで、このように障壁変調メカニズムの異なる不純物等が VI 属原子とともに存在する場合、どのような影響があるかを理論の立場から探った。

今回は NiSi/Si(2x2) 界面構造のセルを用意して S 原子ペアを界面 Si 側に導入し、これに対する不純物原子、欠陥の影響を調べた。まず、代表的なドーパントである As 原子、B 原子を S 原子ペアと同濃度でシリコン側に配位した場合の構造を図 1 (a)、図 2 (a) に示す。図中において、青がニッケル原子で赤がシリコン原子である。置換位置にある S 原子ペアと As 原子、B 原子は赤い破線の枠で示し、フェルミ面近傍の状態の波動関数の電子分布は緑で示す。図から明らかなように、As 原子と S 原子ペアが共存する場合は、波動関数は NiSi から Si 側に広がっているが、B 原子と S 原子ペアが共存する場合はこの波動関数の染み出しが消えている。(a) の構造に対応して図 1 (b) は As 原子と S 原子ペアが共存する場合の状態密度の変化を青線で、ドーピング無しの場合は赤線で比較して示す。障壁変調は大きく障壁無しの場合に近いが、S 原子ペアだけの場合に比べると減少する。図 2 (b) は B 原子と S 原子ペアが存在する場合の状態密度の変化を青線で、ドーピング無しの場合は赤線と比較して示す。障壁変調はほぼ消え、S 原子ペアと B 原子の影響はほぼ相殺してしまうことが分かってきた。このように、それぞれ障壁変調のメカニズムが違う機構においても、最も安定なエネルギー構造をとることによってそれぞれの変調機構が相殺しあい、障壁変調が決まることが分かってきた。さらに、欠陥と S 原子ペアとの共存においては非常に特徴的なことも分かってきた。これらも合わせて報告したい。

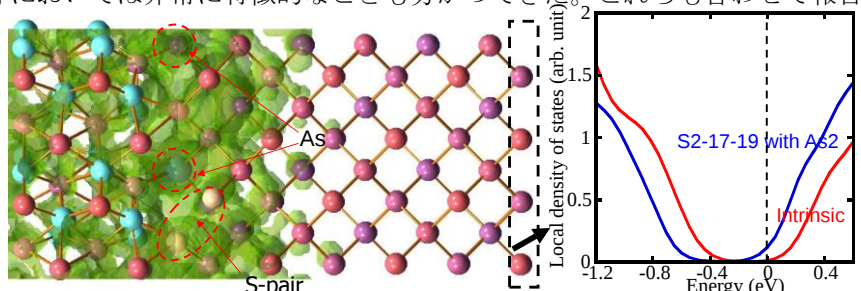


Fig.1 (a) NiSi/Si structure doped with S-pair and 2As

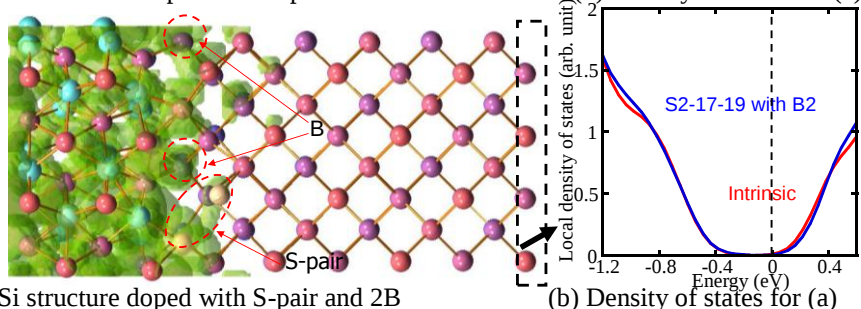


Fig.2 (a) NiSi/Si structure doped with S-pair and 2B

[1] K. Kato et al., ICPS-31(2012), 加藤他春応物 2013 28p-G9-7 [2] 加藤他秋応物 2013 20p-B4-1