

C₃H₅ クラスターイオン注入による近接ゲッターリングサイトに関する第一原理解析 First principles analysis on proximity gettering sites formed by C₃H₅ cluster ion implantations

○白澤 渉¹, 末岡浩治¹, 山口 直², 前川和義³

岡山県大院情報工¹, ルネサスエレクトロニクス², ルネサスセミコンダクタマニュファクチャリング³

○S.Shirasawa¹, K.Sueoka¹, T.Yamaguchi², K.Maekawa³

Okayama Pref. Univ.¹, Renesas Electronics², Renesas Semiconductor Manufacturing³

E-mail: shirasawa1201@gmail.com

[研究背景] 最近, C₃H₅ クラスターイオン注入による近接ゲッターリング¹⁾が報告されているが, TEM 観察でも欠陥が検出できない場合があり, ゲッターリングサイトは同定されていない.

本研究では第一原理計算法を用いて C₃H₅ クラスターイオン注入で形成可能なゲッターリングサイト (複合体) を求め, さらに LSI で主に用いられる 12 種類の金属との結合エネルギーを計算することで, どのような複合体がゲッターリングに寄与しているかを推定した. ゲッターリングサイトとして, C, H, P, O 原子(D と表記)や D 同士の複合体(D₂), D-点欠陥の複合体を扱った.

[計算方法] 計算ソフトは CASTEP を使用し, 汎関数は GGA-PBE を用いた. カットオフエネルギーは 340 eV である. また, 3 次元周期境界条件を課した.

ゲッターリングサイトを構成する元素としてイオン注入元素である C と H, ドーパントである P, さらに Si ウェーハに含まれている O 原子を扱った. また, イオン注入に伴って発生する点欠陥 (原子空孔 V と格子間 Si I) も考慮した. 金属として Ti, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Mo, Hf, Ta, W 原子の 12 種類を扱った.

[計算結果と考察] 置換 C, 格子間 H, 置換 P, 格子間 O 原子と金属との結合エネルギーを図 1 に示す. Fe は B によりゲッターリングされることが実験的に知られており, 予備計算で算出した Fe-B の結合エネルギー(0.65 eV)をゲッターリングの指標とした. これより, 格子間 H は Ni や Zn などを除いて金属と高い結合エネルギーを持つことがわかる. これに対し, 置換 C, 置換 P, 格子間 O 原子は有効なゲッターリングサイトにならない.

計算結果は膨大となるため, ここでは H を含む最も単純な複合体の計算結果を述べる. 結果を図 2 に示すが, CH, PH < IH < VH の順で金属との結合エネルギーが増加することがわかる. VH 複合体は形成しやすい計算結果も得られており, C₃H₅ クラスターイオン注入においてゲッターリングサイトの 1 つである可能性が高い. 当日は, 他の複合体も含めた計算結果を系統的に整理・解析した結果を発表する.

[まとめ] 本研究では第一原理計算法を用いて C₃H₅ クラスターイオン注入で形成されるゲッターリングサイト (複合体) を求め, さらに LSI で主に用いられる 12 種類の金属との結合エネルギーを計算することで, どのような複合体がゲッターリングに寄与しているかを推定した. 得られた結果は以下の通りである.

- (1) 格子間 H 原子と金属原子は高い結合エネルギーを持つ.
- (2) 置換 C, 置換 P, 格子間 O 原子は有効なゲッターリングサイトにならない.
- (3) VH 複合体が C₃H₅ クラスターイオン注入においてゲッターリングサイトの 1 つである可能性が高い.

[参考文献]

1. 栗田他, 第 62 回応用物理学会春季学術講演会 (2015) 12p-A18-13.

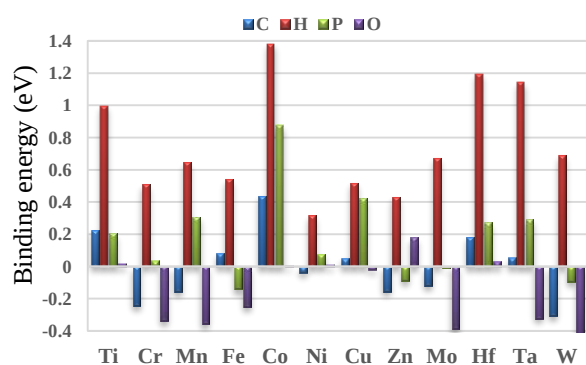


Fig. 1 Binding energies of C, H, P and O with metals.

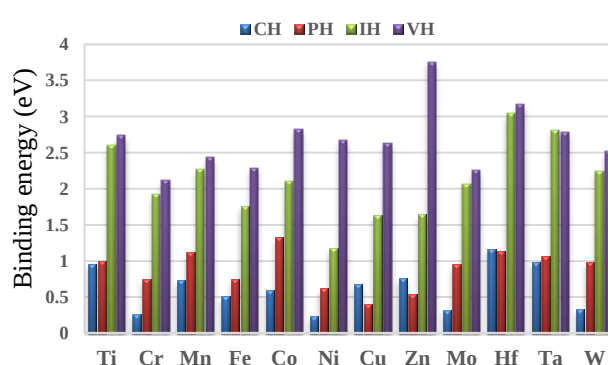


Fig. 2 Binding energies of CH, PH, IH and VH with metals.