

IV 族半導体における点欠陥と拡散

Defects and Diffusion in IV Semiconductors

慶大 理工, TCAD 研究開発センター[†] ○植松 真司

Keio Univ., Graduate School of S&T, TCAD R&D Center[†] ○Masashi Uematsu

E-mail: uematsu@a3.keio.jp

はじめに：半導体プロセスにおいて、不純物拡散をいかに制御よく行うかは、最も重要な課題の一つである。そのために、半導体中の拡散について、その機構を点欠陥のレベルから深く知り、その知識に基づいて拡散を精度よく予測する必要がある。本講演では、重要な半導体材料である IV 族半導体において、点欠陥がどのように拡散を支配しているか、特に原子サイズに焦点を当てて述べる。

点欠陥と拡散機構：半導体母体の点欠陥に、自己格子間原子 (I: self-interstitial) と空孔 (V: vacancy) の 2 種類があり、不純物原子は単独で拡散するのではなく、この 2 つの点欠陥と相互作用しながら拡散する[1]。その拡散機構の一つが、I を介した機構で ($A_i \rightleftharpoons A_s + I$)、I が格子位置にある不純物原子 (A_s , 添字 s: substitutional) を可動な格子間位置 (A_i , 添字 i: interstitial) に蹴りだして拡散が進むので、キックアウト機構と呼ばれる。もう一つは、V を介した機構で ($V + A_s \rightleftharpoons A_s + V$)、隣接した V と位置を交換しながら不純物原子が動く。

各種半導体における拡散：Si 中の拡散においては、I と V 両方の寄与があり、高温では I、低温では V の寄与がより大きいことが、Si 安定同位体を用いた拡散実験から明らかとなっている[2]。また、B や P はキックアウト機構、Sb は空孔機構、As は両方の機構で拡散する。すなわち、不純物原子のサイズが大きいほど、格子間原子にはなりにくく、空孔機構の寄与が主となる。一方、Ge 中の拡散においては、高温から低温まで V の寄与が主である[3]。これは、Ge は原子サイズが大きいために、I が存在しにくいと考えられる。Ge 中の不純物拡散は、Si と比較して、活性化エネルギーが小さく、拡散も速い。これは、Geの方が母体原子結合エネルギーが小さく、原子間距離も大きいことに起因している。また、拡散係数は $Sb > As > P > SD > B$ (SD は自己拡散) の順で、Si 中の拡散とほぼ逆の順番となっている。Ge では V の寄与が主であるため、I を介して動く B は拡散しにくく、また、サイズの大きな原子ほど V との相互作用が大きいため拡散が速いと考えられる。SiGe 中の拡散は、Ge 組成 (x) によって不純物拡散や自己拡散が大きく変化する。図に歪緩和 $Si_{1-x}Ge_x$ 中の Sb 拡散[4]、As 拡散[5]、および、Si、Ge 自己拡散[6]の活性化エネルギーの Ge 組成依存性を示す。Ge 組成が 0.3 程度までは緩やかに減少し、0.3 以上で急激に減少していることから、Ge 組成が 0.3 程度までは、SiGe 中の拡散は Si に近い性質を持ち、I と V の寄与が共存していると言える。一方、0.3 以上では、Ge 濃度とともに V の寄与が主となっている。また、強い原子間結合力を持つため、SiC 中の拡散は非常に遅い。原子サイズ依存性から SiC では I が主であると推測される。

[1] M. Uematsu, JAP **82**, 2228 (1997) およびその引用文献。

[2] Y. Shimizu *et al.*, PRL **98**, 095901 (2007). [3] E. Hüger *et al.*, APL **93**, 162104 (2008). [4] A. N. Larsen *et al.*, APL **68**,

2684 (1996). [5] P. Laitinen, *et al.*, PRB **68**, 155209 (2003).

[6] R. Kube *et al.*, JAP **107**, 073520 (2010).

[†] 慶應義塾大学 TCAD 研究開発センター (略称 TRDEC)

は、2016 年 4 月に設立された民間企業共同出資によるコンソーシアム型の委託研究拠点である。

URL : <http://www.karc.keio.ac.jp/center/center-58.html>

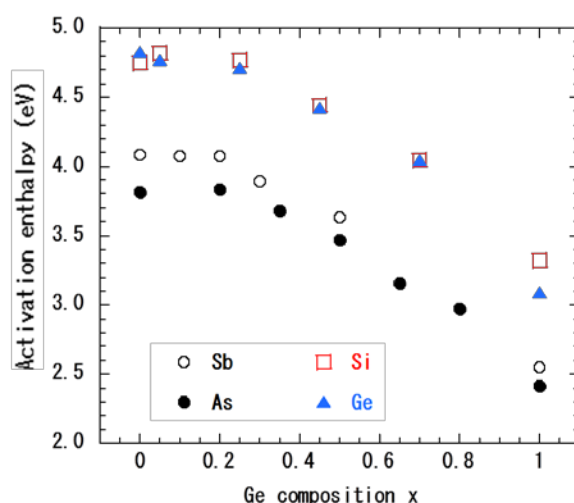


Fig. Ge composition dependence of activation enthalpy of Sb diffusion [4], As diffusion [5], Si and Ge self-diffusion [6] in relaxed $Si_{1-x}Ge_x$.