

Si 結晶中のドーパント複合体と重金属の相互作用に関する第一原理解析

First-principles analysis on interaction between metal atom and dopant complex in Si crystal

岡山県立大¹, ソニーセミコンダクタマニュファクチャリング株式会社² [○]永倉大樹^{1,2}, 末岡浩治¹

Okayama Pref. Univ.¹, Sony Semiconductor Manufacturing Corporation²

[○]Hiroki Nagakura^{1,2}, Koji Sueoka¹

E-mail: Hiroki.Nagakura@sony.com

【緒言】CMOSイメージセンサの製造工程における意図しない金属汚染は、フォトダイオード(PD)の空間電荷中に深い不純物準位、すなわちキャリアの発生・再結合中心を形成し、白キズ特性の悪化をもたらす。これまで、第一原理計算により単独のアクセプター原子またはドナー原子と各種金属元素の結合エネルギーが評価されている¹⁾。ところで、CMOSイメージセンサのデバイス領域において、アクセプターとドナーが混在する領域も含まれている。しかしながら、アクセプターとドナーが混在する領域を対象とした第一原理解析はあまり行われていない。そこで本研究では、アクセプターとドナーの相互作用について、さらにドーパント複合体と重金属の相互作用について第一原理解析により知見を得ることを目的とした。

【計算方法】慣用単位格子を $2 \times 2 \times 2$ 倍した、Si原子64個からなる立方体の計算モデルを用意した。図1に示すように、このモデルの中心にドーパント原子を配置し、さらにその第一近接から第九近接まで他のドーパント原子を配置した時の結合エネルギーを第一原理計算法により求めた。

【ドーパント同士の結合エネルギーの計算結果】図2に各種ドーパント同士の結合エネルギーの計算結果を示す。横軸は近接位置を示している。これより、BとAsの組み合わせでは最近接位置が最安定であり、BとPの組み合わせでは互いの第二近接が最安定であることが分かる。また、PとAsの組み合わせでは、第八近接が最安定となった。これらの結果は、ドーパント間の電気的な相互作用とドーパント原子のサイズにより説明が可能である。当日は、ドーパント複合体と金属の結合エネルギーの計算結果についても議論する。

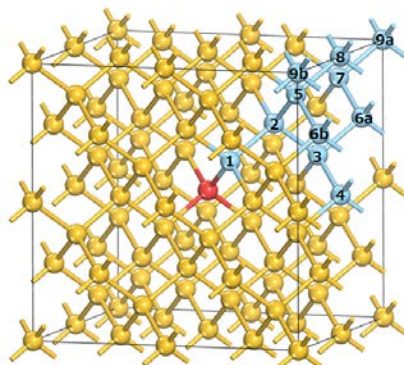


図1 Si64原子モデルにおける近接位置

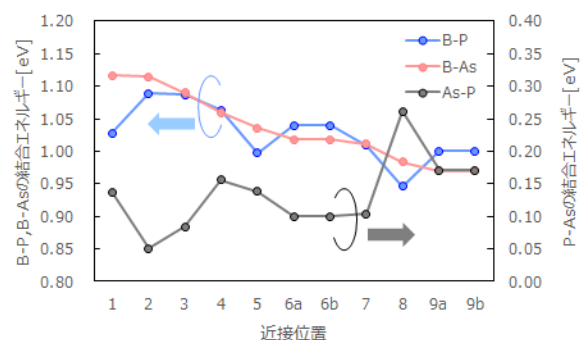


図2 ドーパント同士の結合エネルギー

[1] K. Sueoka et al., Advances in Materials Science and Engineering Vol. 2009, Article ID 309209.