「箱庭法」を用いた，pn 接合部に対する金属元素のゲッタリング解析

Analysis of metal gettering in pn junctions by Hakoniwa method

グローバルウェーハズ・ジャパン㈱[1], 岡山県大情報工[2] ○神山 栄治[1, 2], 永倉 大樹[2], 末岡 浩治[2]

GlobalWafers Japan Co., Ltd.[1], Okayama Pref. Univ.[2], °E. Kamiyama[1], H. Nagakura[2], K. Sueoka[2]

E-mail: ejkamiyama@aol.com

１．はじめに

Si 系デバイスにおける金属不純物のゲッタリングは，近年，撮像素子の分野で特に重要となっており，実デバイスを念頭に置いた第一原理解析がなされるようになっている[1]．本発表では，「箱庭法」[2]を適用する一例として，各種デバイスのキー要素である pn 接合部における，金属のゲッタリング挙動を解析する手法について述べる．なお，当グループでは，「箱庭法」を用いたゲッタリングや不純物固溶度についての解析に関して，多くの報告を行っている[3]．

２．pn 接合の第一原理計算モデル作成

pn 接合の各要素を，図 1 に示すように３つの領域に分ける．次に，これらの 3 領域に対応する第一原理計算モデルを作成し，各モデル中の対象とする 3d 金属原子を配置する．そして，第一原理計算を実行して，エネルギーを求める．

３．「箱庭法」の解析結果

得られた計算結果を元に，pn 接合を深さ方向で一次元にモデル化した「箱庭」を考える．Well 部以下の構造を無視し，表面からの汚染金属が，指定する温度の熱平衡において，深さ方向の各部にどのような割合で分布するかを求める．高濃度ドープ層のドープ量と深さをそれぞれ $5\times10^{19}/cm^3$ と 800 nm, well 中のドープ量を $1\times10^{17}/cm^3$ として，空乏層厚さを 200 nm（逆方向バイアス～2V 時に対応）とする．この時，メタル分布が熱統計学に従うと仮定し，各指定温度において，リーク電流に敏感な空乏層内に，指定する金属元素が存在する確率 p を算出する．そして，表面からの金属汚染に対して，単位面積($1cm^2$)あたりの空乏層内に金属原子の個数期待値が 0.5 個となる汚染量（→許容汚染濃度/cm^2）を求める．図 2 に，(a) N-well と(b)P-well 中に作製された各々の pn 接合に対し，700 K の熱平衡状態における各 3d 金属の許容汚染濃度 $N_{critical}$ の算出例を示す．

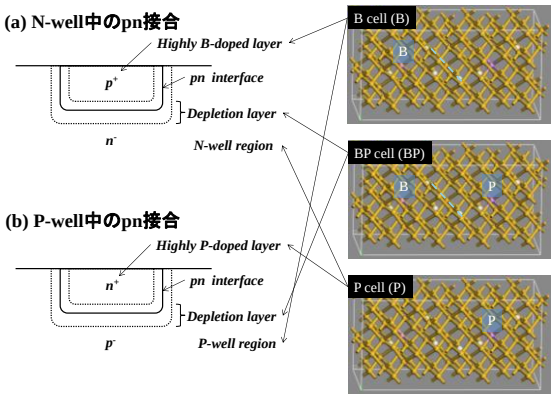

図 1 pn 接合の各領域に対する第一原理計算モデル

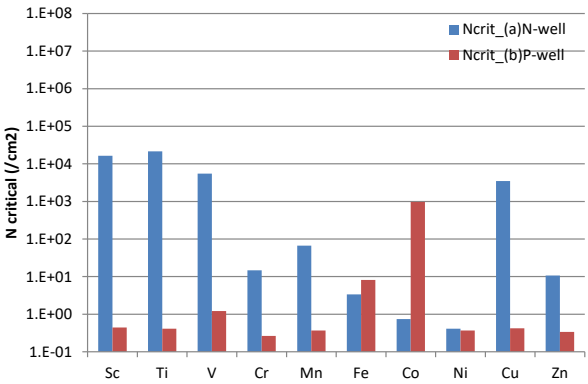

図 2 「箱庭法」による解析結果の 1 例

参考文献

1. 永倉他，2019 年秋応物 18p-C212-6
2. E. Kamiyama et al., *Materials Science in Semiconductor* Processing, **43**, 209 (2016).
3. E. Kamiyama et al., *ECS J. Solid State Science and Technology*, **4**, P232 (2015); *ibid*. **5**, X1 (2015) ; E. Kamiyama et al., *Phys. Status Solidi (c)*, **13**, 746 (2016); A. Yamada and K. Sueoka, *ECS J. Solid State Science and Technology*, **6**, P125 (2017); K. Toyosaki and K. Sueoka, *ECS J. Solid State Science and Technology*, **6**, P326 (2017); K. Tadano and K. Sueoka, *Materials Science in Semiconductor Processing*, **63**, 45 (2017).

© 2020年 応用物理学会