



Title	第一原理計算に基づくシリコン結晶欠陥の挙動に関する研究
Author(s)	古橋, 壮之
Citation	大阪大学, 2006, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/46934
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏 名 古 橋 壮 之

博士の専攻分野の名称 博 士 (工 学)

学 位 記 番 号 第 20343 号

学 位 授 与 年 月 日 平成 18 年 3 月 24 日

学 位 授 与 の 要 件 学位規則第 4 条第 1 項該当

工学研究科電子情報エネルギー工学専攻

学 位 論 文 名 第一原理計算に基づくシリコン結晶欠陥の挙動に関する研究

論 文 審 査 委 員 (主査)

教 授 谷 口 研 二

(副査)

教 授 谷 野 哲 三

教 授 北 山 研 一

教 授 片 山 光 浩

助教授 松岡 俊 匡

助教授 丸 田 章 博

助教授 森 伸 也

論 文 内 容 の 要 旨

本論文は低リーク電流化の足掛かりとなるべく、リーク電流の原因と考えられる微小な結晶欠陥の原子的挙動に関する研究結果をまとめたものであり、以下の 5 章で構成した。

第 1 章では、将来の半導体デバイスにおける懸念材料であるリーク電流に関する現在までの研究報告状況について述べた。また本研究のフレームワーク、及び本論文の構成についての概略を述べた。

第 2 章では、ボロンの Si/SiO_2 界面トラップ現象に関する研究を行った。p 型ポリシリコン・ゲート電極を使用したデバイスで、ポリシリコン中のボロンが絶縁酸化膜中へ拡散し、シリコン基板中のチャネル領域におけるドーパント濃度を上昇させる。この現象をボロン突き抜けと呼ぶ。近年、このボロン突き抜けの対処法として、シリコン酸化膜の代わりにシリコン酸窒化膜を利用する動きが広まっている。このとき、絶縁膜本来の仕様を満たし、且つ絶縁膜中の窒素分布を正確に行う必要がある。これにより、ゲート電極からのボロン突き抜けは抑制されるものの、未だソース・ドレインのエクステンション領域から絶縁酸化膜へのボロン突き抜けによるゲート・リーク電流の増加が懸念されている。本研究では、ボロン突き抜けの第一ステップである Si/SiO_2 界面へのボロン偏析について、原子レベルでのメカニズムを解析した。これによりボロン偏析の主な原因は絶縁酸化膜及びポリシリコン・ゲートの成長時に生じる Si/SiO_2 界面での酸素空孔であることがわかった。また、酸素空孔にボロンが捕獲される際、水素原子が補助的に働くことを示した。

第 3 章では、シリコン空孔による酸素増速拡散メカニズムの解析を行った。Czochralski 法により製造されたシリコン基板中において最も主要な不純物は酸素原子である。通常、酸素原子は Si-Si 結合中心で安定になる。酸素原子が移動する場合には、この Si-Si 結合中心から隣接する Si-Si 結合中心へと順番に飛び移る。このとき必要な活性化エネルギーは 2.5 eV と非常に高い。しかし、照射欠陥が存在するシリコン基板中では、酸素原子はシリコン空孔と結びつき、移動エネルギーを 2.0 eV へと引き下げる。このシリコン空孔-酸素ペアは A センターと呼ばれ、原子構造やその電気的特性に関する研究は盛んに行われている。しかし、その形成・分解メカニズムや拡散メカニズムについては未だ明らかになっていない。本研究では原子レベルでのシリコン空孔と酸素の結合・分解メカニズムを解析した。シリコン空孔-酸素ペアの移動には、酸素の移動が主に働くものとシリコン空孔の移動が主に働くものの 2 通りについて検証し、どちらの過程も過去の実験値を再現することが出来た。さらに、シリコン空孔-酸素ペアの分解メカニズムに

についても解析し、分解に必要な活性化エネルギーは拡散に必要な活性化エネルギーよりも低いことを明らかにした。

第4章では複空孔-酸素複合欠陥の形成・分解メカニズムの解析を行った。接合形成技術の複雑化によりシリコン基板における欠陥量の増加が懸念される。デバイスが微細化するにつれ、これまであまり重要視されなかった原子サイズの欠陥による電気的特性への影響を考慮する必要がある。シリコン結晶中での複空孔-酸素複合欠陥は非常に深い準位を持ち、発生・再結合中心として振舞う。これにより pn 接合部ではリーク電流が流れる。今後、デバイスの低消費電力化や信頼性の向上には、pn 接合リーク電流の発生要因である複空孔-酸素複合欠陥の形成・分解メカニズムの理解が重要となる。本研究では、複空孔及びシリコン空孔-酸素ペアを基にした複空孔-酸素複合欠陥の形成・分解について解析した。その結果、過去の実験報告による複空孔-酸素複合欠陥を軸とした、一連の V_xO_y 複合欠陥の反応過程を説明することが出来た。

第5章では、本論文で取り上げた各研究での成果についてまとめた。

論文審査の結果の要旨

集積回路の大規模化及び移動体端末機器の需要拡大に伴うシリコンデバイスの高信頼性化・低消費電力化の要求に対して、MOS (Metal Oxide Semiconductor) デバイスの低リーク電流化は必要不可欠な課題である。本論文は、リーク電流の発生要因となるシリコン結晶中の空孔や空孔と不純物の複合欠陥など微小欠陥の形成と分解及び拡散メカニズムを第一原理計算により解明・解析した結果をまとめたものである。その主要な成果は以下の通りである。

- (1) 将来のシリコンデバイス開発における懸念材料であるリーク電流に関して、その発生メカニズムを中心に現在までの研究報告状況を調査し、解明すべき課題を抽出すると共に本研究の意義と位置付けを行っている。
- (2) Si/SiO₂ 界面において、ドレイン・ソースのエクステンション領域からゲート酸化膜へのボロン偏析に去るゲート・リーク電流の増加が推測される。本研究では、ボロン突き抜けの第一ステップである Si/SiO₂ 界面へのボロン偏析について、その発生メカニズムを解析した。ボロンは絶縁酸化膜の成長時に生じる Si/SiO₂ 界面での酸素空孔に捕獲されることにより酸化膜側に偏析することを明らかにしている。また、酸素空孔がボロンを捕獲する際、水素原子が補助的に働くことも解明している。
- (3) シリコン空孔による酸素増速拡散メカニズムを解析している。Czochralski 法により製造された単結晶シリコン基板中において最も主要な不純物は酸素原子である。酸素原子が拡散する為に必要な活性化エネルギーは 2.5 eV で非常に大きい。しかし、酸素原子はシリコン空孔と結びつくことによって、拡散エネルギーは 2.0 eV へと減少する。この空孔-酸素ペアの原子構造やその電気的特性に関する研究は盛んに行われてきたが、形成・分解過程や拡散メカニズムについては未だ明らかになっていない。本研究では、第一原理計算により空孔と酸素の結合・分解過程を解析している。また、シリコン空孔-酸素ペアの拡散メカニズムについても解析し、分解メカニズムとの相違点を明らかにしている。
- (4) シリコン結晶における複空孔-酸素複合欠陥の形成・分解メカニズムの解析を行っている。複空孔-酸素複合欠陥は非常に深い準位を持ち、電子・正孔の発生・再結合中心として振舞う。これにより pn 接合部分ではリーク電流が流れる。シリコンデバイスの低消費電力化や信頼性の向上には、接合部のリーク電流低減が不可避であり、その原因である複空孔-酸素複合欠陥の形成・分解メカニズムの理解が重要となる。本研究では、複空孔及びシリコン空孔-酸素ペアを基にした複空孔-酸素複合欠陥の形成・分解メカニズムを解析・解明している。

以上のように、本論文はシリコン結晶中の微小欠陥の形成・分解メカニズムを第一原理計算に基づき解明し、同時にその拡散過程を解析することによりリーク電流の起因の一つを明らかにした。この成果は、MOS デバイスの低消費電力化の革新的な技術を提案するものであり、次世代デバイス開発に多大な貢献をするものである。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。