



Title	Materials design for the gettering of diffusive 3d transition elements in silicon
Author(s)	松川, 和人
Citation	大阪大学, 2006, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/47319
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、 ＜a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed >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	まつ 松 かわ 川 かず 和 ひと 人
博士の専攻分野の名称	博 士 (工 学)
学 位 記 番 号	第 2 0 6 0 7 号
学 位 授 与 年 月 日	平成 18 年 6 月 16 日
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第 4 条第 1 項該当 基礎工学研究科物質創成専攻
学 位 論 文 名	Materials design for the gettering of diffusive 3d transition elements in silicon (シリコン中における 3d 遷移金属の拡散挙動解明とゲッターリングマテリアル・デザイン)
論 文 審 査 委 員	(主査) 教 授 吉 田 博 (副査) 教 授 三 宅 和 正 教 授 菅 滋 正 助教授 白 井 光 雲

論 文 内 容 の 要 旨

半導体デバイスにおけるプロセス中での遷移金属を主とした金属汚染起因の欠陥によるデバイス特性の劣化、及び信頼性の低下は大きな問題となりつつある。従って、このような金属がデバイス中、すなわちシリコン (Si) 中でどのような挙動を示すかを理解する為には、半導体中の不純物や結晶欠陥の微視的な電子構造、荷電状態、格子緩和有無での結晶構造などを解明する必要がある。本研究で用いる第一原理計算プログラム「Osaka2K2」は平面波展開による擬ポテンシャル法電子状態計算プログラムであり、基本は密度汎関数理論に基づいて電子の基底状態をセルフコンシステントに求めるものである。平面波展開法は数学的表現として非常に簡明であるため原子間力、ストレスの評価が容易となる。従って、本方法において構造の最適化、原子の動的性質を扱う際には最適手法となる。そこで本研究では、実験レベルで確認されている 3d 元素を中心とした遷移元素のシリコン中での拡散現象を第一原理計算により確認するとともに、実験により得られた定性的な知見と比較し、拡散機構を考究する。さらに、同手法を用いて半導体中の不純物金属元素の低減手法である「ゲッターリング」機構についてもそのメカニズムを解明することに成功した。

本手法により 3d 元素等を効率よくゲッターリングする「ゲッターリング・マテリアル」の探索、設計を行った結果、B、C、N、O などの軽元素を co-doping することにより、安定なゲッターリングマテリアルを形成することを明らかにし、半導体プロセスにおける効果的なゲッターリングマテリアルの形成に成功した。以上より第一原理計算によるゲッターリング・マテリアル・デザインの開発という新たな技術開発に寄与した。

論 文 審 査 の 結 果 の 要 旨

シリコン半導体デバイス創製では、プロセス中に混入する遷移金属不純物を主とする金属汚染起因の欠陥により、デバイス特性の劣化や信頼性の低下が生じる。これらは、超微細化の進むシリコン半導体産業において、現在製造プロセス上の深刻な問題となりつつある。このような金属がデバイス中、すなわちシリコン (Si) 中でどのような挙動

を示すかを理解し、それを制御する為には、半導体中の不純物や結晶欠陥の微視的な電子構造、荷電状態、格子緩和、不純物複合欠陥などを解明する必要がある。松川和人君は、半導体中の不純物の電子状態を第一原理から計算し、微視的な機構を探るため、平面波展開による擬ポテンシャル法による第一原理電子状態計算プログラムである「Osaka2K2」により、密度汎関数理論に基づいて電子の基底状態をセルフコンシステントに求めた。平面波展開法は数学的表現として非常に簡明であるため原子間力、ストレスの評価が容易であり、シリコン中の遷移金属不純物複合体の構造の最適化、原子の動的性質を扱う際には最適手法となることを示した。計算結果に基づいて、実験レベルで確認されているシリコン中の 3d 遷移金属不純物の拡散機構を第一原理計算により解明するとともに、実験により得られた拡散障壁の原子番号依存性に関する知見と比較し、遷移金属不純物の微視的な拡散機構と原子番号依存性を解明し、定量的に説明した。また、実験により、ゲッターリングの効果を定量的に評価する手段を確立し、デバイス構造や不純物原子種による依存性を明らかにした。さらに、第一原理計算による微視的な拡散機構に立脚して、半導体中の不純物金属元素の低減手法である「ゲッターリング」機構について、そのメカニズムを解明することに成功した。さらには、超高速で拡散する Cu、Ni、Co などの 3d 遷移金属不純物を効率よくゲッターリングする「ゲッターリング・マテリアル」の探索とデザインを行った。その結果、B、C、N、O などの軽元素を co-doping することにより、安定なゲッターリングマテリアルを形成することを明らかにし、半導体プロセスにおける効果的なゲッターリングマテリアルのデザインに成功した。本研究により第一原理計算によるゲッターリング・マテリアル・デザインの開発という新たな技術開発に寄与した。以上の理由により、博士（工学）の学位論文として価値のあるものと認める。