

シリコン半導体デバイス中のドーパント拡散シミュレータの開発

○増田 剛¹、古山通久¹、久保百司^{1,2}、今村 詮³、宮本 明^{1,4}¹ 東北大学大学院工学研究科 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 07)² 科学技術振興機構さきがけ (〒332-0012 埼玉県川口市本町 4-1-8)³ 広島国際学院大学工学研究科 (〒739-0321 広島市安芸区中野 6-20-1)⁴ 東北大学未来科学技術共同研究センター (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 10)

【緒言】近年、半導体素子の小型化・高集積化は急速に進み、半導体素子の微細化は限界に達しようとしている。このような極微小領域中のドーパントの拡散を検討するためには、原子・電子レベルの現象を考慮しつつ、そのダイナミクスも計算する必要がある。そこで、本研究では研究室独自に開発した Tight-Binding 量子分子動力学計算プログラムを用いてシリコン半導体中のドーパント拡散現象の検討を行った。

【計算方法】量子分子動力学計算には、当研究室で開発した高速化量子分子動力学計算プログラム Colors を使用した。ドーパント原子には p 型半導体を作るのに一般に用いられる B 原子を選択した。空孔の無いシリコン結晶中 (Si_{64}) の格子間に B 原子が 1 つ入ったモデルと、このモデルからシリコン原子を取り除き、空孔を 1 個作成したモデルを用いて温度 27°C、500°C のシミュレーションを行った。

【結果】空孔の無いシリコン中の格子間に B 原子を 1 つ配置したモデルにおいて温度 27°C では、格子間に配置した B 原子は格子点に入ることは無く、その格子間に留まった状態でほとんど動くことは無かった。温度 500°C では、格子間に配置した B 原子は、隣の格子間に移動し(図 1)、B 原子の格子間拡散の一端が見られた。

また、シリコン原子を一つ取り除いて空孔を 1 個作成したモデルでは、温度 27°C、500°C で共に、格子間 B 原子は B 原子と空孔の間に位置するシリコン原子を空孔の方に押し出し、格子位置に収まるのが確認された(図 2)。このときの B 原子の結合状態を調べるために原子の結合状態を表す指標である Bond population(図 3)を解析したところ、B 原子は約 250[fs]後に Si(d)原子と、また、約 1100[fs]後に Si(a)原子と新たな結合を形成し、最終的に 4 つのシリコン原子と結合したのが確認できた。

以上の結果より、シリコン結晶中の格子間に在る B 原子は近くに空孔が存在しないと 500°C 程度の熱処理により格子間を拡散することが分かった。また、B 原子の近くに空孔が 1 つ存在すると、B 原子と空孔の間に位置するシリコン原子を空孔方向に押し出して格子点に入ることが分かった。

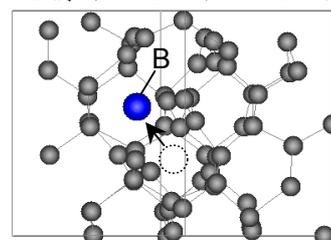


図 1 空孔の無いシリコン結晶中の B 原子拡散 (温度 500°C)

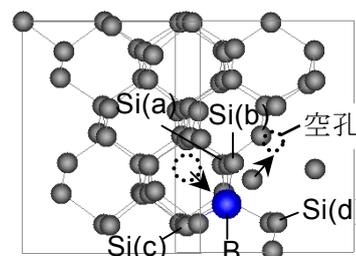


図 2 空孔が一つ存在するモデルでの構造変化図 (温度 27°C)

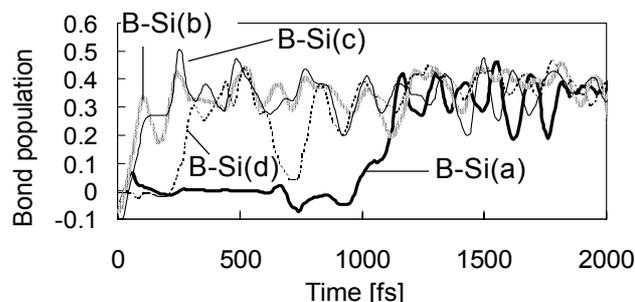


図 3 B-Si 結合の bond population 解析結果 (温度 27°C)