

## 平成 19 年度顕在化ステージ 事後評価報告書

シーズ顕在化プロデューサー所属機関名:株式会社ルネサステクノロジ

研究リーダー所属機関名 :大阪大学

課題名:半導体中の遷移金属不純物の新ゲッターリング方法の理論的開発とその実証研究

### 1. 顕在化ステージの目的

半導体デバイスでは、プロセス中に混入する遷移金属不純物がデバイス特性を劣化させる。この問題の対策として、デバイス領域から十分離れた領域に適当なドーパント原子を入れ不純物を吸い取らせるゲッターリング法が取られている。デバイススケールが小さくなるにつれ、より高いゲッターリング収率を持つ新しいゲッターリング法の開発が必要であり、本課題ではこの問題を解決することを目的に、大学で開発された強力な第一原理計算シミュレーション手法を活用し、ゲッターリングの微視的機構の解明に基づく新たなゲッターリング複合体を含む結晶材料の作製とゲッターリング能力の評価、デバイス特性評価による有効性検証を行う。

### 2. 成果の概要 ※研究実施者の完了報告書より抜粋

#### ○大学の研究成果

第一原理計算を用いて、Cu に対する有効なゲッターリングセンターとなる不純物複合体を探索した。ゲッターリング効率は Cu との結合エネルギー $E_b$  で評価できるが、 $E_b$  の値で 1 eV を上回るものを目標とした。膨大な候補中で BO 複合体が  $E_b$  の高いものが多く、その中で特に  $\text{BNO}_2$  が 2.1 eV と大きな値で、ゲッターリングセンターとして有望であることを見いだした。

実際の問題はいかに意図した複合物を形成できるかである。化学ポテンシャルの計算を通じて作成条件デザインの基礎を行い、Bドーパダイヤモンドの予測で成功した。また Cu 複合体の作る不純物状態や格子空孔についても重要な貢献をし、全体として不純物制御に寄与した。

#### ○企業の研究成果

理論計算によりデザインされたゲッターリング・マテリアルを複合したウエーハの試作に成功し、さらに計算で予想された遷移金属に対する高ゲッターリング能力も実験により確認された。さらには、N,N+C のドーピングによるデバイス特性(電気特性)にも影響を及ぼすことなく、次世代半導体に適用可能な目処がついた。

### 3. 総合所見

概ね期待通りの成果が得られ、イノベーション創出が期待される。Cu に対して有効な新しいゲッターリング材料を計算により見出し、その複合体を含む結晶・ウエーハを作成した。遷移金属の一種による汚染を行い、そのゲッターリング能力を評価し理論計算の間接的な検証が行われた。今後、半導体プロセスへの実用化に向け、更なるデータ蓄積と有効性検証が期待される。