

Ni シリサイド化速度の Si 結晶構造依存性 -分子動力学法による解析-
 Dependence of Ni Silicidation Rate on Si Crystal Structure by Molecular Dynamics

早大理工¹橋本 修一郎¹, 小杉山 洋希¹, ソン セイ¹, 武井 康平¹,
 木谷 哲¹, 凶師 知文¹, 渡邊 孝信¹

Waseda Univ.¹ S. Hashimoto¹, H. Kosugiyama¹, J. Sun¹, K. Takei¹,
 T. Kitani¹, T. Zushi¹ and T. Watanabe¹

E-mail: hashimoto@watanabe.nano.waseda.ac.jp

【はじめに】Si-CMOS デバイスのブーストテクノロジーとして、ソース・ドレイン領域のメタル化技術が盛んに研究されている。特に Ni シリサイドは比抵抗が低く、シリサイド化反応時の Si 消費量が少ないため、メタルソース/ドレイン材料の有力候補として期待が寄せられている。これまで我々は、Si ナノワイヤの作製プロセスにおける熱履歴の違いが、シリサイド化速度に影響を及ぼすことを明らかにした[1]。本学術講演会で別途行う講演[2]では、熱履歴と Ni シリサイド化速度の関連をより詳細明らかにするため、Ni シリサイド化した Si ナノワイヤ内部の残留応力および結晶性を、顕微ラマン分光測定で評価した結果を報告する。本講演では、原子論的な視点で、Si 格子歪および結晶性と Ni シリサイド化反応速度との関係を明らかにするため、Si 結晶中の Ni 原子拡散の分子動力学シミュレーションを実施した。

【シミュレーション方法】Si 結晶およびそのアモルファス構造の再現で実績のある Stillinger-Weber 型原子間ポテンシャル関数をベースに、Matthai[3]が開発したポテンシャルパラメータを加え、Si, Ni 2 元系の相互作用モデルを用意した。Si との格子ミスマッチが最も小さい NiSi₂ 構造を Si 結晶に積層させ (図 1)、三次元周期境界条件および温度一定(2000K)の条件下で数 100ps スケールの分子動力学計算を実施した。これを、単位胞サイズを変えて圧縮および引張歪を印加した NiSi₂/Si/NiSi₂ 積層構造にて行い、シリサイド界面近傍の Ni 原子の拡散速度と Si 格子歪との関係を調査した。また、Si 結晶をアモルファス化させた NiSi₂/a-Si/NiSi₂ 構造において同様の計算を実施し、結晶性の低下が拡散速度に与える影響についても調査した。

【結果】図 2(a)に Ni 原子の平均拡散速度と Si 格子歪の関係を示す。ここでは拡散速度を無歪時の拡散速度で規格化している。計算の結果、圧縮歪を印加した場合、Ni 原子の拡散速度が抑制されることが分かった。これは、歪の印加により Si 結晶の格子間距離が変化し、Ni 原子の格子間拡散に影響を及ぼしたためと考えられる。ただし、講演[2]で報告する実験によると、残留圧縮応力が強い試料で Ni シリサイド化速度が向上しており、本計算結果とは一致しない。一方、アモルファス Si と Si 結晶中の Ni 原子の拡散速度にも違いが見られ (図 2(b))、アモルファス化による拡散速度の増

加が確認された。これは、結晶性の低下と Ni シリサイド化速度向上との間にも相関が見られるという実験結果[2]と一致している。以上を踏まえ、Si ナノワイヤにおける Ni シリサイド化速度の変化の主要因は酸化膜に誘起された様な格子歪ではなく、SiO₂/Si 界面付近の結晶性の乱れである可能性が高い。

【謝辞】本研究は科学研究費補助金・基盤研究(B)と挑戦的萌芽研究の支援を受けて行われた。

【参考文献】[1] H. Yamashita, et al., 26th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, 2013. [2] ソンセイ他, 第 75 回応用物理学会秋季学術講演会(発表予定) [3] C.C.Matthai, Molecular Simulation 3, p.101, 1989.

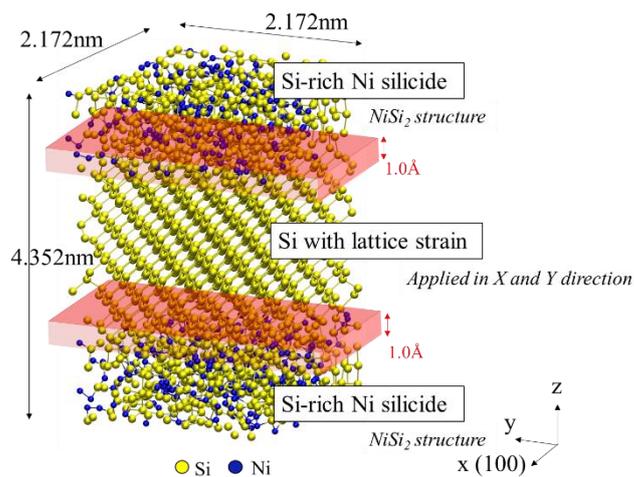


図 1. NiSi₂/Si/NiSi₂ の積層構造モデル

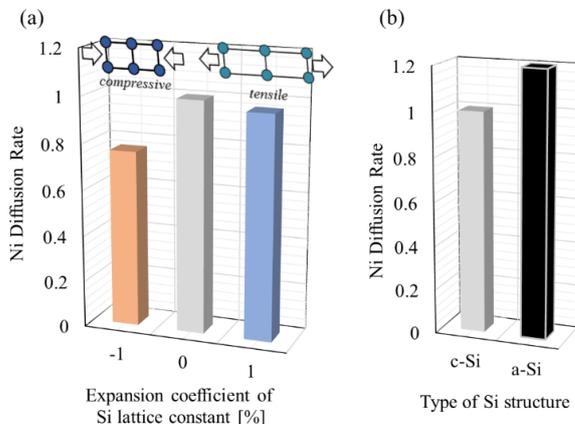


図 2.(a) Ni 拡散速度の格子歪依存性

(b) Si 構造のアモルファス化による Ni 拡散速度の変化