20a-PA2-11

分子シミュレーションによる Si 表面の空孔クラスタと Ni 原子の相互作用の解析

Interaction between Vacancy Cluster on Si Crystal Surface and Ni Atom Studied by Molecular Simulation

早大理工 [1]，豊田工大 [2]，°木谷 哲 [1]，橋本 修一郎 [1]，武良 光太郎 [1]，今津 研太 [1]，小花 紘暉 [1]，神岡 武文 [2]，渡邉 孝信 [1]

Waseda Univ.[1], TTI[2], °T. Kitani[1], S. Hashimoto[1], K. Mura[1], K. Imazu[1],G. Obana[1], T. Kamioka[2], and T. Watanabe[1]

E-mail: tetsu.kitani@gmail.com

【はじめに】トランジスタの微細化と共に顕在化する、短チャネル効果や直列抵抗の増大などの問題の解決方法として、Ni シリサイド（Ni_xSi_y）等によるソース・ドレインのメタル化が検討されている。しかし Ni シリサイドの成長速度は基板結晶方位に依存するため、制御が難しい。例えば Ni シリサイドがチャネル領域に侵入し、オフリーク電流の増加を招くという問題が報告されている[1]。これに関して、シリサイド化させる領域に予め Si イオンを注入し格子空孔を生成させておくと、Ni が空孔の存在する領域に向かって優先的に拡散し、チャネル領域への侵入を抑制できることが報告されている[2]。これまでに我々は Ni シリサイドと空孔の相互作用、及び Ni シリサイドの形成メカニズムを解明するため、超高真空 STM と低速イオン銃複合装置[3,4]を用いた Ni イオン照射過程のリアルタイム STM 観察を行ってきた。その結果、Fig.1 に示すように、Ni シリサイドと考えられる表面構造が Si(111)基板表面の空孔型欠陥の周縁部に選択的に形成されている様子を撮影することに成功した[5]。本研究では、Si 結晶中において、空孔型欠陥周縁部に生じた構造が Ni を含む構造である可能性を検討するため、Si、Ni 混在系の分子動力学シミュレーションにより、Ni 原子の安定サイトの表面構造依存性を調査した。

【シミュレーション手法】Si 結晶の再現において実績のある Stillinger-Weber 型原子間ポテンシャル関数をベースとして、Matthai[6]が開発した 2 体および 3 体ポテンシャルパラメータ、Si-Ni、Si-Si-Ni を加えたポテンシャルを用意した。Si(111)面を上面として、上面に 1 層分の欠陥を有する Si 結晶の表面直下の一箇所、及び、欠陥周縁部の二箇所に Ni 原子を配置したモデルをそれぞれ作成した（Fig.2）。室温での各モデルにおいて、Ni 原子を Si 結晶内部で y 方向に移動して再配置しながら、各位置における系全体のポテンシャルエネルギーをそれぞれ計算した。

【結果および考察】Ni 原子の各位置における系全体のポテンシャルエネルギーのヒストグラム（度数分布図）を Fig.3 に示す。Ni 原子を空孔型欠陥の側壁に配置したモデルにおける全ポテンシャルエネルギーは、Si 結晶の表面に配置した場合と比較して、約 240meV 低かった。したがって Ni 原子は Si 結晶において、表面よりも空孔型欠陥の側壁において、より安定して存在することが分かった。本結果は、Ni シリサイドが空孔型欠陥の周縁部に選択的に形成されたという実験結果を支持するものである。

【謝辞】本研究は科学研究費補助金・基盤研究(B)、及び挑戦的萌芽研究の支援を受けている。

【参考文献】[1] T. Yamaguchi et al., Jpn. J. Appl. Phys. **48** (2009) 066513.
[2] T. Yamaguchi et al., IEEE-Trans. Ele. Dev., **56** (2009) 206-213.
[3] M. Uchigasaki et al., Rev. Sci. Instrum. **76**, (2005) 126109.
[4] T. Kamioka et. al., Rev. Sci. Instrum. **79**, (2008) 073707.
[5] 武良光太郎 他，第 74 回応用物理学会秋季学術講演会 (2013) 18P-C1-4.
[6]C.C.Matthai, Molecular Simulation **3**, (1989) 101.

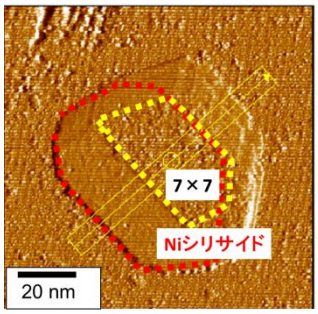

Fig.1 Magnified image of a vacancy-type defect formed on Si(111) surface [5].

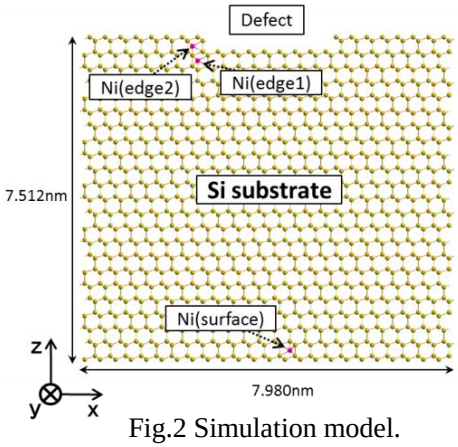

Fig.2 Simulation model.

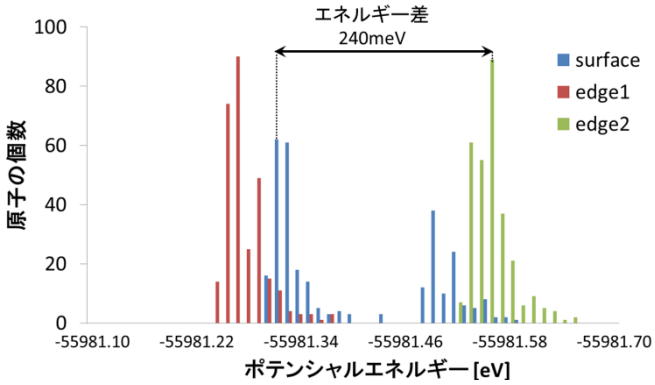

Fig.3 Potential energy histogram.

© 2014 年　応用物理学会