

V-MOSFET の Si/SiO₂(001)界面における熱酸化過程、 水素アニール効果の歪み依存性

First principles study on the strain dependence of thermal oxidation and
hydrogen annealing effect at Si/SiO₂ interface in V-MOSFET

○川内 伸悟¹、白川 裕規¹、洗平 昌晃^{2,1,5}、影島 博之^{3,5}、
遠藤 哲郎^{4,5}、白石 賢二^{2,1,5}

(1.名大院工、2.名大未来研、3.島根大院総合理工、4.東北大院工、5.JST-ACCEL)

○Shingo Kawachi¹, Hiroki Shirakawa¹, Masaaki Araidai^{2,1,5}, Hiroyuki Kageshima^{3,5},
Tetsuo Endoh^{4,5}, and Kenji Shiraishi^{2,1,5}

(1. Nagoya Univ., 2. IMaSS, Nagoya Univ., 3. Shimane Univ., 4. Tohoku Univ., 5. JST-ACCEL)

E-mail: kawachi@fluid.cse.nagoya-u.ac.jp

Vertical MOSFET (V-MOSFET) [1]は次世代の FET 素子として期待されている。その理由は、構造に起因する高いゲート電圧効果のおかげで、回路全体の電圧を下げて動作するためリーク電流を抑えることができるからである。しかし、V-MOSFET の製造過程で柱状 Si を熱酸化する際に Si-missing(Si 消失)という現象が起こり、柱状構造を維持できなくなるという問題が生じている。この原因として柱状構造という次元性がその起源であるという報告がされている [2]。さらに、平面型に比べ Si/SiO₂ 界面における歪みが生じていると考えられているが原子レベルの詳細は明らかになっていない。そこで本研究では Si/SiO₂ 界面における熱酸化の歪み依存性について、密度汎関数法に基づく第一原理計算によって検討した。プログラムは VASP(Vienna Ab initio Simulation Package)[3,4]を用いた。歪み依存性を調べるために、Si/SiO₂(001)界面モデルに圧縮歪み加えることによって V-MOSFET を表現した。また、Si 円柱の軸方向に引っ張り歪みを加えポアソン比は 0.3 とした。そして Si 放出前後のエネルギー差を計算することで評価した。また、熱酸化工程後の水素アニール工程の効果についても歪み依存性を調べた。

第一原理計算の結果、熱酸化の際には歪みが大きくなるにつれ、Si 原子を放出するエネルギー利得も増加することがわかった(Fig. 1)。この結果は、V-MOSFET を製造する工程では平面型 MOSFET に比べて Si 放出が起こりやすいということを意味する。すなわち、界面に生じる歪みが要因で、柱状型の Si の熱酸化では平面

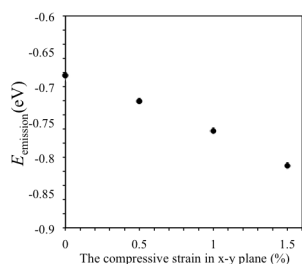


Figure 1. The strain dependence of energy gain of Si emission from the Si/SiO₂ interface.

型に比べて Si 放出が生じやすくなる。これは V-MOSFET においては Si-missing が生じやすいことを示唆している。

さらに、歪みを印加した際の水素アニール条件について熱統計力学的手法を用いて考察した [5]。Fig. 2 の中のそれぞれの歪みに対応した曲線の下側の水素分圧-温度領域で水素アニールが効果的である。Fig. 2 から典型的な実験条件(500°C, 0.2atm) では、1%の歪みでも界面の欠陥を改善することができないという結果が得られた。つまり、V-MOSFET での水素アニールはより平面 MOSFET よりも低温で行う必要があることを示している。

References

- [1] T. Endoh, K. Sakui, and Y. Yasuda, IEICE Trans. Electron., Vol.E93-C, no.5, pp.557-562 (2010).
- [2] H. Kageshima, K. Shiraishi, and T. Endoh, Jpn. J. Appl. Phys. **55**, 08PE02, (2016).
- [3] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **47**, 558, (1993).
- [4] G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11169, (1996).
- [5] Y. Kangawa, et al., Surf. Sci. **507-510**, 285 (2002).

*)本研究は、JST-ACCEL「縦型 BC-MOSFET による三次元集積工学と応用展開(代表:遠藤哲郎)」の支援の下に行われた。

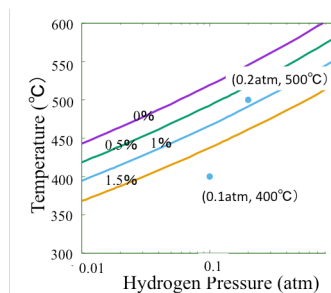


Figure 2. The dependence of strain about p - T diagram on hydrogen termination. Above the each line, hydrogen molecules cannot terminate Si dangling bonds. On the other hand, below each line, Si dangling bonds can be terminated by H atoms.