

# V-MOSFET における Si/SiO<sub>2</sub>(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の第一原理計算による考察

First principles study on the strain dependence of thermal oxidation and hydrogen annealing effect at Si/SiO<sub>2</sub> interface in V-MOSFET

°川内 伸悟<sup>1</sup>、白川 裕規<sup>1</sup>、洗平 昌晃<sup>2,1,5</sup>、影島 博之<sup>3,5</sup>、  
遠藤 哲郎<sup>4,5</sup>、白石 賢二<sup>2,1,5</sup>

(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 Kawachi<sup>1</sup>, Hiroki Shirakawa<sup>1</sup>, Masaaki Araidai<sup>2,1,5</sup>, Hiroyuki Kageshima<sup>3,5</sup>,  
Tetsuo Endoh<sup>4,5</sup>, and Kenji Shiraishi<sup>2,1,5</sup>

(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)[1-3]では、その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と考えられている。さらに縦型にすれば、素子1つの面積が小さくなり1つの集積回路により多くの素子を詰め込めるため、ただ薄くするよりも利点がある。以上の理由から、V-MOSFETは次世代のFET素子として期待されている。しかし、このV-MOSFETを製造する過程で柱状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Si/SiO<sub>2</sub>界面において平面型に比べ歪みが生じていることが考えられるが原子レベルでは明らかになっていない。

そこで本研究ではSi/SiO<sub>2</sub>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)[4-7]を用いた。歪み依存性を調べるために、Si/SiO<sub>2</sub>(001)界面平面型モデルのx, y軸方向の長さをそれぞれ1, 2, 3, 4, 5%面内に等方的に歪みを加え、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0%の状態から大きくなるにつれ、Si原子を放出するエネルギーが下がっていることが分かった。つまり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が分かった。その結果、柱状型のSiの熱酸化では界面に生じる歪みが要因でSi放出が平面型に比べて生じやすくなる。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統計力学的手法を用いて考察した。図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。図2から典型的な実験条件(500℃, 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低温で行う必要がある。

## References

- [1] T. Endoh, K. Sakui, and Y. Yasuda, IEICE Trans. Electron., Vol.E93-C, no.5, pp.557-562 (2010).
- [2] T. Imamoto, and T. Endoh, IEICE. Electron., Vol.E95-C, no.5 (2012).
- [3] T. Endoh and Y. Norifusa, IEICE Trans. Electron., Vol.E92-C, no.5 (2009)
- [4] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B 47, 558, (1993).
- [5] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B 49, 14251, (1994).
- [6] G. Kresse and J. Furthmüller, Comput. Mat. Sci. 6, 15, (1996).
- [7] G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B 54, 11169, (1996).

\*)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。

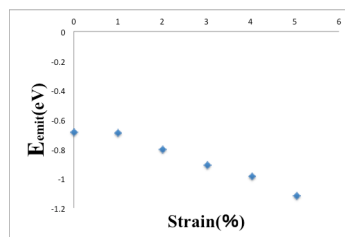


図1 Si放出について歪み依存性である。E<sub>emit</sub>の値が小さくなるほど界面から、よりSiを放出し易いことを示している。

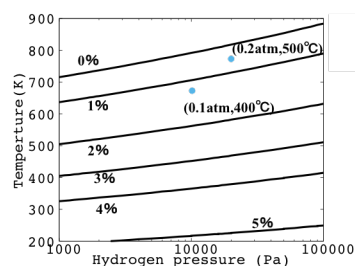


図2 水素終端について、歪み印加下のp-Tダイアグラム。それぞれの線について下の領域の条件では、水素アニールが効果的であることを示している。