

Si 放出モデルに基づく Si 熱酸化過程の面方位依存性に関する理論的研究 Theoretical study on interface orientation dependence of Si thermal oxidation based on Si emission model

名大院工¹, 名大未来研², 島根大院総合理工³, 東北大院工⁴, 国際集積セ⁵, JST-ACCEL⁶

名倉 拓哉¹, 川内 伸悟¹, 長川 健太¹, 白川 裕規¹, 洗平 昌晃^{1,2,6}, 影島 博之^{3,6},
遠藤 哲郎^{4,5,6}, 白石 賢二^{1,2,6},

¹Graduate School of Engineering, Nagoya Univ., ²IMaSS, Nagoya Univ.,

³Interdisciplinary Graduate School of Science and Engineering, Shimane Univ.,

⁴Graduate School of Engineering, Tohoku Univ., ⁵CIES, Tohoku Univ., ⁶JST-ACCEL,
Takuya Nagura¹, Shingo Kawachi¹, Kenta Chokawa¹, Hiroki Shirakawa¹, Masaaki Araidai^{1,2,6},
Hiroyuki Kageshima^{3,6}, Tetsuo Endoh^{4,5,6} and Kenji Shiraishi^{1,2,6}

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

1. 研究背景

近年の MOSFET の微細化に伴い、サブスレッショルド・リーク電流が増加していることが問題となっている。このリーク電流を減らすために、新たに縦型 BC-MOSFET が提案された[1]。しかし、Si pillar を酸化する工程において、missing-Si 現象により、Si pillar が形を保つことができないことが大きな問題となっている[2]。また、先行研究において、熱酸化過程で生まれた歪みを解放するために、Si 原子が自発的に放出されることが確認されており[3]、これが missing-Si 現象の原因であると推測される。Si pillar を酸化する際には、Si の様々な面方位が現れる。よって本研究では、Si の様々な面方位で熱酸化シミュレーションを行い、面方位依存性を確認する。

2. 計算条件

本研究では、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を行った。計算パッケージは、VASP を利用した。計算モデルは、Si(100), (110), (111), (310)/SiO₂ 界面の Slab モデルを用いた。ブリュアンゾーンの積分には、5×3×1 の Monkhorst-Pack grids を用いた。カットオフエネルギーは 500eV とした。また、Si 原子放出時のエネルギー変化 ΔE は、以下の式で定義される。

$$\Delta E = E_{\text{after emitting}} + E_{\text{Si atom}} - E_{\text{before emitting}}$$

ここで、 $E_{\text{after emitting}}$ は Si 原子放出後の系のエネルギー、 $E_{\text{before emitting}}$ は Si 原子放出前の系のエネルギー、 $E_{\text{Si atom}}$ は Si 原子一個のエネルギーを示している。

3. 計算結果

面方位ごとの、 ΔE の推移を Fig.1 に示す。(100),(110),(310)については、導入 O 原子の面密度が大きくなるにつれて、 ΔE の値が小さくなっていることが分かる。ここで、 ΔE が小さくなるということは、界面の歪みがより大きくなり Si 原子が放出されやすくなっていることを示す。よって、酸化が進むにつれ

て、Si 原子が放出されやすくなっていることが分かる。

しかし一方で(111)面に関しては、途中で ΔE が増えている点がある。これは、Fig.2 に示すように(111)面には2種類の Si-Si 結合があり、酸化されるボンドの種類が途中で変わることにより起因するのだと考察される。この詳細な議論は講演で行う予定である。

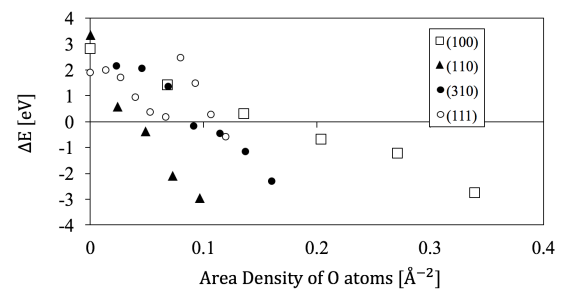


Fig.1: Energy change after the ejection of a Si atom during oxidation of the Si/SiO₂ interface.

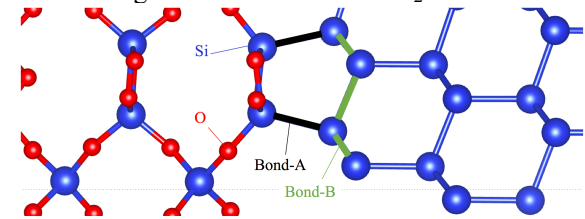


Fig.2: Si(111)/SiO₂ slab model. This figure shows 2 types bonds of Si-Si bonds.

Acknowledgement

This work has been supported by a grant from “Three-Dimensional Integrated Circuit Technology Based on Vertical BC-MOSFETs and Exploration of their Advanced Applications” (Research Director: Prof. Tetsuo Endoh, Program Manager: Dr. Toru Masaoka) of ACCEL under JST (JPMJAC1301).

Reference

- [1] T.Imamoto, T.Endoh, IEICE. Trans,Electron. **E95-C**, 807 (2012).
- [2] H. Kageshima, K. Shiraishi, and T. Endoh, Jpn. J. Appl. Phys. **55**, 08PE02 (2016).
- [3] H. Kageshima and K. Shiraishi, Phys. Rev. Lett. **81**, 5936 (1998).