高温 SiO₂と SiO₂+SiO の自己拡散係数の揺らぎ

Fluctuation of self-diffusion coefficient on high-temperature SiO₂ and SiO₂ + SiO 矢島雄司¹,白石賢二^{2,4},遠藤哲郎^{3,4},影島博之^{1,4} Yuji Yajima¹,Kenji Shiraishi^{2,4},Tetsuo Endoh^{3,4},and Hiroyuki Kageshima^{1,4} 1 島根大学,2 名古屋大学,3 東北大学,4 JST-ACCEL 1 Shimane Univ.,2 Nagoya Univ.,3 Tohoku Univ.,4 JST-ACCEL E-mail: s179630@matsu.shimane-u.ac.jp, kageshima@ecs.shimane-u.ac.jp

平面型集積回路デバイスの極微細化に伴う問題を解決するため、縦型 BC-MOSFET[1,2]は大変有望なデバイスで ある。しかし三次元型である縦型 BC-MOSFET の作成においては、ゲート酸化膜形成の Si 熱酸化時にミッシング Si 現象などの問題が発生し制御が難しい[3]。三次元での Si 熱酸化過程は応力や粘性が強く影響し、二次元での酸 化過程とは異なっている[4]。また、Si 熱酸化過程においては界面から酸化膜中に SiO が発生することも知られて おり、発生した SiO の挙動も酸化過程を左右する[5]。今回は前回[6]に引き続いてこの酸化現象を解明しようと、 SiO₂ の動特性について第一原理分子動力学法によって探求を進めていく上で判明した、特性値の揺らぎについて の検討を行った。

計算プログラムは"VASP"を使用し、計算条件や計算手順は[7]の先行論文と同じにした。擬ポテンシャルは超ソフト型、カットオフエネルギーは 400eV、 k 点は Γ 点サンプリング、タイムステップ幅 Δ t は 1fs を採用した。格子定数 10.32 A の立方体の単位胞内に 24 個の SiO₂分子(以下 24SiO₂と呼ぶ)を考え、シミュレートした。この体積 は融点でのアモルファス SiO₂の実験データを基にしている。まず 24SiO₂を低温低圧で安定な α -quartz 的構造に配置しこれを 3ps 間 10000K の温度に保つ。次に 10000K から 6000K に 3ps 間で冷やし、その後 100ps 間 6000K に保 ち、動特性を調べた。この過程を 10 回行った。つまり初期構造と与えた温度は等しく計算手順も同じであるが、 各原子の初期速度分布が異なる場合について個別に 10 回計算を行った。24SiO₂の構造に Si 原子と O 原子 各 1 個 を中心付近に配置した場合(以下 24SiO₂+SiO と呼ぶ)についても同じように計算した。

まず Si と O についての平均二乗変位 (MSD)を求めた。ここでは重心の変位を引いた MSD を使用している。次 に各 MSD より自己拡散係数 D を求めた。Si の D の分布を Fig.1 に示す。24SiO₂ と 24SiO₂+SiO の二つの構造の D の平均値と不偏分散と不偏標準偏差を Table 1 に示す。ここで用いた各 D は 6000K の温度に保持を開始してから 10⁻¹ps経過した以降の時間平均の値を用いており、両方の計算毎にDは一定の値に収束している。Fig.1 および Table 1 から言えるのは、温度として入力した初期速度分布の違いにより最終的な自己拡散係数の値は同じにならずに幅 ができて、系毎に値が異なるということである。以上より、系の時間平均と複数の系の平均が異なっていること が示された。SiO を追加した効果を確認するために 24SiO₂ と 24SiO₂+SiO を比較してみると、その差は分散の大 きさの程度であり、有意な差は認められない。このようになった原因は添加した SiO の数が少ないためと考えら れ、さらなる検討を行う必要がある。

[1] T. Endoh, K. Sakui, and Y. Yasuda, IEICE Trans. Electron. E93-C, 557 (2010).

[2] T. Imamoto and T. Endoh, IEICE Trans. Electron. E95-C, 807 (2012).

[3] H. Kageshima, K. Shiraishi, and T. Endoh, Jpn. J. Appl. Phys. 55, 08PE02 (2016).

[4] M. Uematsu et al, Solid State Electronics 48, 1073 (2004).

[5] H. Kageshima, K. Shiraishi, and M. Uematsu, Jpn. J. Appl. Phys. 38, L971 (1999).

[6] 矢島雄司他、第 64 回応用物理学会春季学術講演会、横浜、15p-P14-2 (2017).

[7] B. B. Karki, D. Bhattarai, and L. Stixrude, Phys. Rev. B 76, 104205 (2007).

謝辞)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」(研究代表者:遠藤哲郎) (JPMJAC1301)の助成を受けて実施した。



Table 1. 24SiO₂ と 24SiO₂+SiO の Si と O の D の平均値(AVE) と不偏分散(σ^2)と不偏標進偏差(σ)

	24SiO ₂		24SiO ₂ +SiO	
	Si	0	Si	0
$AVE(10^{-9}m^2/s)$	28.199	37.617	28.255	35.241
$\sigma^2(10^{-18} \text{m}^4/\text{s}^2)$	21.847	30.349	14.003	3.153
$\sigma(10^{-9} { m m}^2/{ m s})$	4.6741	5.509	3.7421	1.7757

