

高温 SiO₂ の動特性の酸素濃度依存性

Oxygen density dependence of dynamical characteristics on high-temperature SiO₂

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リーク電流の問題を解決するため、縦型 BC-MOSFET[1,2]について研究開発が進められている。しかし三次元型である縦型 BC-MOSFET の作成において、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ことが知られている[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ることも知られている[4]。また、Si 熱酸化過程においては Si/SiO₂ 界面から酸化膜中へと SiO が発生することも知られ、発生した SiO の挙動が酸化過程に影響する[5]。本研究は高温での SiO₂ の動特性が酸素濃度変化について、つまり SiO 濃度に対してどういった変化を示すのかを明らかにしようとするねらいである。

計算プログラムは“VASP”を使用、計算条件や計算手順は[6]の先行研究を参考にした。格子定数 10.32 Å の立方晶の単位胞内に 24 個の SiO₂ 分子(以下 24SiO₂ と呼ぶ)を配置し、この 24SiO₂ から酸素を取り除くことで SiO_x の x を変化させる。酸素を抜いた数を N_{VO} とした。 N_{VO} は SiO 濃度と比例関係にあり、 N_{VO} が大きいと SiO 濃度も大きい。計算手順として初めに各構造を低温低压で安定な α -quartz 的構造に配置し、3ps 間 10000K の温度に熱し保つ。次に 3000, 4000, 5000, 6000K に 3ps 間でそれぞれ冷やし、その後 100ps 間一定の温度に保ち、動特性を調べた。

まず Si と O についての平均二乗変位 (MSD) を求め、次に自己拡散係数 D を求めた。Fig. 1 を見ると、Si, O ともに高温では変化が少なく、低温では N_{VO} に対する変化が大きいことが分かる。また N_{VO} の値が小さい範囲では N_{VO} に対する D の変化が大きい。そのため、低温であり N_{VO} が小さい範囲であれば、自己拡散係数の変化はより大きくなることが予測される。求めた D より各構造の活性化エネルギーと pre-factor を求めた。Fig. 2 をみると酸素を抜いた数を増やすことにより、 D_0 と E_a ともに減少している。どの程度減少しているかに着目すると、 N_{VO} が小さい範囲では N_{VO} に対して Si, O の特性ともに大きく変化し、 N_{VO} がある一定以上の値の範囲では、変化が緩やかになっている。Si と O の違いに注目すると、O は N_{VO} に対し線形的に変化をしているように見えるが、Si はそうではないように見える。これは拡散機構の違いによるものと考えられる。

[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] 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。一部の計算は東京大学物性研究所の大型計算機センターを使って行った。

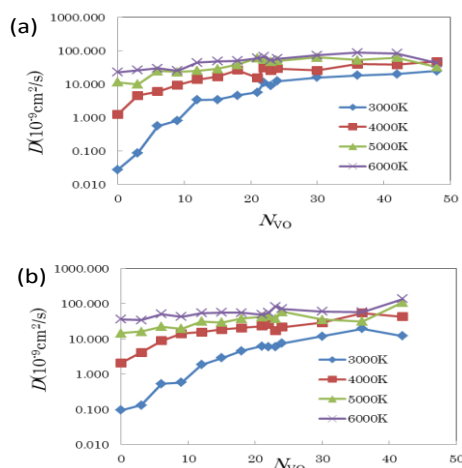


Fig. 1 (a) Si と (b) O の N_{VO} に対する自己拡散係数

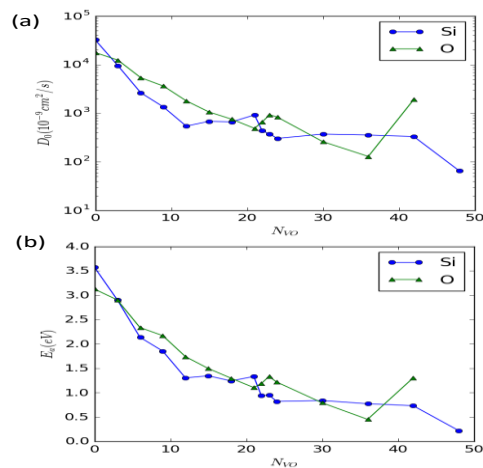


Fig. 2 N_{VO} に対する (a) D_0 と (b) E_a