

# 酸素欠損のある SiO<sub>2</sub> の動特性に関する圧力効果と温度効果の検討

## Study of pressure and temperature effects on dynamical properties for SiO<sub>2</sub> with oxygen vacancy

矢島雄司<sup>1</sup>, 白石賢二<sup>2,4</sup>, 遠藤哲郎<sup>3,4</sup>, 影島博之<sup>1,4</sup>  
 Yuji Yajima<sup>1</sup>, Kenji Shiraishi<sup>2,4</sup>, Tetsuo Endoh<sup>3,4</sup>, and Hiroyuki Kageshima<sup>1,4</sup>

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@riko.shimane-u.ac.jp

平面型半導体の極微細化に伴いリーク電流の問題が顕在化し、従来の性能向上が望めなくなった。これを解決するために三次元型の柱形の縦型 BC-MOSFET [1,2]について研究開発が進められている。しかしこのデバイス作成において、ゲート酸化膜の Si 熱酸化時に、Si が次第に細くなり最終的に柱の Si が一部なくなってしまう現象が起きてしまうことが知られている [3]。以前の研究より、この形状崩壊の原因は Si 酸化膜(Si/SiO<sub>2</sub>)界面から SiO<sub>2</sub> 中への SiO の放出にあると示されている [4-5]。本発表では柱状 Si の酸化膜界面付近における SiO<sub>2</sub> 中の Si 拡散に対する圧力効果、温度効果、並びに SiO の濃度効果を検討する。以前の結果 [6]を元に、SiO<sub>2</sub> 中の Si の拡散における圧力効果の温度依存性を第一原理分子動力学法により解析した。

計算条件、手順は[6]と同じように行った。前回は 3000 K の計算のみであったが今回は 3000, 4000, 5000, 6000 K で計算をそれぞれ行い温度の効果を含んだ解析を行った。

まず各条件での Si の自己拡散係数  $D_{Si}$  を求めた。次に各  $D_{Si}$  を低圧力の範囲内で圧力の 2 次関数の指数関数、式(1)としてそれぞれの  $N_{VO}$  の条件下でフィッティングを行った。3000 K と 6000 K の  $N_{VO}$  が 0 の場合を図 1, 2 にそれぞれ示す。次に  $D_{Si}$  の圧力依存性と  $N_{VO}$  依存性を求める。 $D_{Si}$  は式(1)のように圧力との関係式で求められ、[8]での  $D_{Si}$  の関係式に圧力 (P)依存性も考慮したものが式(2)となる。

$$D_{Si} = \exp(A_1 + A_2P + A_3P^2) \dots (1)$$

$$D_{Si} = D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{k_bT} + B_1N_{VO} + \frac{B_2N_{VO}}{k_bT} + B_3P + B_4P^2\right) \\ \times \exp\left(\frac{B_5P + B_6P^2}{k_bT} + (B_7P + B_8P^2)N_{VO} + \frac{B_9P + B_{10}P^2}{k_bT}N_{VO}^2\right) \dots (2)$$

発表では式(1),(2)を用いて、圧力、 $N_{VO}$ 、温度、に対して  $D_{Si}$  がどのように関係しているかを表し、実際の酸化条件下では SiO<sub>2</sub> 中の Si はどのようにふるまうか、それは Si がなくなる現象をどの程度説明できるかを述べる。

[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] E. Fukuda et al., e-J. Surf. Sci. Nanotechnol. **15**, 127 (2017).

[5] H. Kageshima et al., Jpn. J. Appl. Phys. **57**, 06KD02 (2018).

[6] 矢島雄司 応用物理学会 2018 秋 20a-PA5-3.

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。

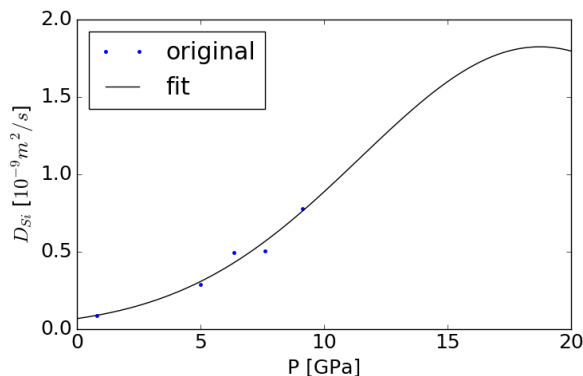


図 1.  $N_{VO}=0$ , 3000 K での圧力に対する  $D_{Si}$  の元データとフィッティングデータ

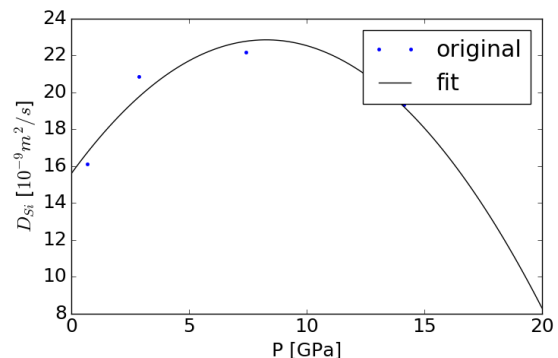


図 2.  $N_{VO}=0$ , 6000 K での圧力に対する  $D_{Si}$  の元データとフィッティングデータ