

歪み酸化膜中の V_O 欠陥拡散の理論検討

Theoretical study on V_O diffusion in strained Si oxide

島根大院自然科学 矢田航平、[○]影島博之
Shimane Univ., Kohei Yata, [○]Hiroyuki Kageshima
E-mail: kageshima@riko.shimane-u.ac.jp

集積回路の進歩により、近年立体型の MOSFET が注目を浴びるようになった。このようなデバイスは従来の平面型 MOSFET と構造が異なるため、様々なプロセス的な課題が懸念される。例えば縦型 BC-MOSFET において直径数十 nm の Si ピラーに熱酸化でゲート絶縁膜を形成することが考えられるが[1]、このような細い Si ピラーを酸化する際には、Si 界面付近の酸化膜中に 5 GPa ほどの圧縮応力が、外側表面付近の酸化膜中には 3 GPa ほどの引張応力が生じる[2]。このことは絶縁破壊などの酸化膜の信頼性にも従来と異なる影響を与えることが考えられる。酸化膜の絶縁破壊は酸化膜中の O 空孔(V_O)関連の欠陥がトリガーとなることが報告されており[3]、酸化膜中に何らかの原因で形成された V_O 関連欠陥が正孔を捕獲し、+1 価の三配位 Si を形成。この三配位 Si が MOSFET 動作によるゲート-チャネル電界下で拡散・凝集し形成した、酸化膜中の Si 界面からゲート界面に至る一次元的な鎖を通してゲートリーク電流が流れ、絶縁破壊に至る。立体型 MOSFET では酸化膜に応力が加わっているため、これらの過程にも影響が出るものと考えられる。

そこで本研究では、絶縁破壊に深く関わる酸化膜中の V_O の基本的な性質への歪みの効果について、酸化膜を結晶である Quartz と Cristobalite でモデル化し第一原理計算を用いて検討を行うこととした。前回は、 V_O の拡散障壁高さが圧縮歪みによって高くなること、Si 密度を横軸にとると Quartz でも Cristobalite でも結晶構造によらずほぼ同じ値を示すことを示した[4]。今回は、なぜ Si 密度が同じだと拡散障壁高さが結晶構造によらず同じなのか、その起源について検討を行った。

V_O の安定構造は図 1(a)に示したようになっており、 O が除かれた Si 原子間には歪みの大きさによって強弱はあるが化学結合ができています。 V_O が拡散する際には拡散する V_O と反対方向に V_O の拡散先の O が移動するが、図 1(b)に拡散の障壁高さを決めている遷移状態の原子構造を示した。拡散障壁高さは遷移状態と関係があるので、まず遷移状態での V_O 欠陥周辺の Si-Si 長や Si-O 長と障壁高さの関係を調べたが、明確な相関は見られなかった。そこで次に拡散前の安定構造の Si-Si 長と障壁高さの関係を調べたところ、今度は明確な相関が見つかった (図 2)。Si-Si 長が長くなると障壁高さはほぼ線形に減少し、この関係は圧縮されて Si 密度が高く Si-Si 長が短い状況から引っ張られて Si 密度が低く Si-Si 長が長い状況までほぼ保たれている。しかも、Quartz か Cristobalite かという SiO_2 の結晶構造の違いにも大きく影響されない。これは、 V_O が拡散する際に、反対に移動してくる O が Si-Si 結合に割って入りやすいかどうかで障壁高さを決めていると考えるべきであることを示している。そして、圧縮歪みを受けている場合には Si-Si 長が結晶構造によらず Si 密度で決まる事が、拡散障壁が Si 密度で決まる起源であると考えられる。

謝辞) 本研究の計算には第一原理計算プログラム PHASE/0 を用いた。本研究の一部は東京大学物性研究所スーパーコンピュータを用いて行った。原子構造モデルの表示には VESTA を用いた。

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

[2] M. Uematsu, et al., Solid State Electron. 48, 1073 (2004).

[3] 鳥海、応用物理 69, 1049 (2000).

[4] 矢田、影島、第 66 回応用物理学会春季学術講演会、11a-PB2-2 (2019).

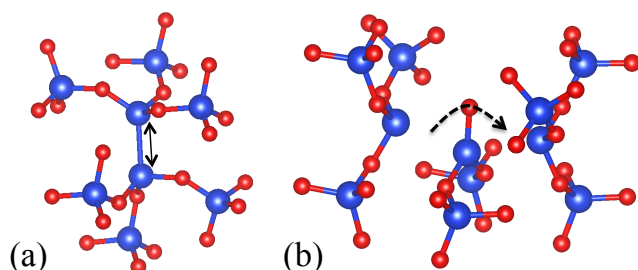


図 1. (a) V_O の安定構造 (矢印は Si-Si 長)、(b) V_O 拡散の遷移状態の原子構造。

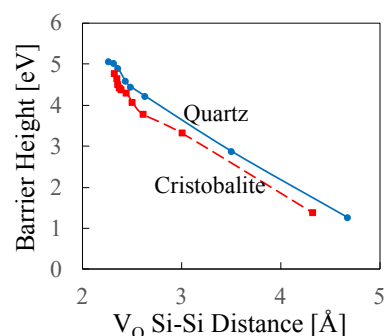


図 2. V_O Si-Si 長と拡散障壁高さの関係