

物理モデルとデータサイエンスの融合に向けた Ge 酸化機構の検討

Consideration of Ge oxidation mechanism for fusion of physical model and data science

名大院工, °田岡紀之

Grad. Sch. of Eng., Nagoya Univ., °N. Taoka

E-mail: noriyuki.taoka@dii.engg.nagoya-u.ac.jp

【背景】これまで膨大な数の Si デバイス、プロセスに関するデータが報告されている。そのため、Si デバイスでは TCAD を用いることによって、正確にデバイス特性やプロセスデータを計算することができる。ただし、TCAD では、ある確からしいデータを基に、実験結果と整合する様にすり合わせている面がある。そのため、Si 以外の材料では、多くのデータを学習し、発展する人工知能の方が特性予測に適していると考えられる。しかし、データを学習するだけでは、実際のデバイスやプロセス中で起こっている物理現象を理解することは困難である。そのため物理モデルとデータサイエンスの融合が求められる。そこで本研究では、簡単な材料・実験系である Ge の酸化プロセスに着目し、その酸化機構の検討を行った。

【計算方法と参考データ】商用のプロセスシミュレータを用いて、Si(001)基板を 900°C から 1300°C の範囲で、酸化温度、酸化時間(t)を変えてドライ酸化を行い、酸化膜厚(d_{ox})の t 依存性を求めた。この計算では、Deal-Grove モデル[1]を用いており、参考文献[1,2]の結果と比較した。また、Ge(001)基板の酸化については、参考文献[3,4,5,6]よりデータを収集した。

【結果および考察】図 1 は、報告されている Ge に対する d_{ox} - t の関係である。酸化温度は 550°C である。 t が 20 分以下においては、 d_{ox} は線形に増加し、その後、傾きが小さくなることからわかる。いわゆる linear/parabolic な挙動を示している。一方で、これらの酸化機構については、Si と異なることが既に報告されている[7,8]。また、注目すべきは、参考文献 3, 4 と 5, 6 では、20min 以降の傾きに大きな違いがある点である。このことは、これらのデータを学習し、 d_{ox} - t を予測すると大きな誤差を含むことを示している。図 2 は、Si および Ge に対して parabolic な領域での d_{ox} - t の傾きを酸化温度に対してプロットしたデータである。赤丸はシミュレータを用いて計算した結果である。計算結果は、酸化温度の上昇と共に、傾きが減少し、1200°C 付近において、傾きが 0.5 に漸近することがわかる。実験結果[1,2]も計算結果と良く整合することがわかる。Deal-Grove モデルによると、これらの挙動は、1200°C 以上においては、酸素の拡散で膜形成が律速されており、それ以下では、界面での反応と酸素の拡散が競合していると解釈することができる。一方、同様な解釈をすると、実験結果[3, 4]では、550°C において、酸素の拡散で膜形成が律速されていると捉えることができるが、参考文献 5, 6 の傾きは、0.3-0.4 であり Deal-Grove モデルで解釈することが難しい。SiO₂ と GeO₂ では、酸素の拡散種が異なることが報告されており[8]、拡散種の荷電状態や酸化膜中の電界などが影響している可能性がある。当日は、より多くのデータを収集した結果を示すと共に、酸化機構について詳細に議論する。

参考文献：1) B. E. Deal *et al.*, JAP, **36**, 3770(1965). 2) S. M. SZE, *Physics of Semiconductor devices*, 2nd ed. NY, Wiley, 1983. 3) T. Sasada *et al.*, JAP, **106**, 073716 (2009). 4) M. Kobayashi *et al.*, JAP, **106**, 104117(2009). 5) S. K. Sahari *et al.*, J. Physics: Conference Series, **417**, 012014(2013). 6) Y. Wang *et al.* JVST A, **12**, 1309(1994). 7) X. Wang *et al.*, APL, **111**, 052101(2017). 8) H. Li *et al.*, APL, **110**, 222902(2017).

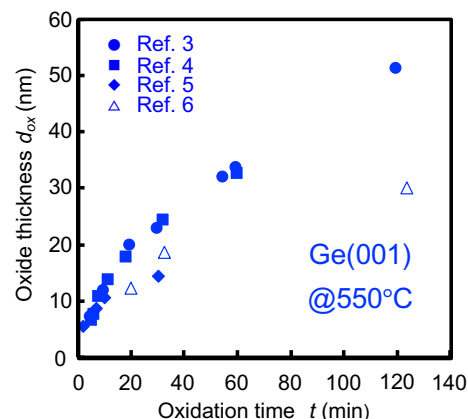


Fig. 1: Relationships between d_{ox} and t .

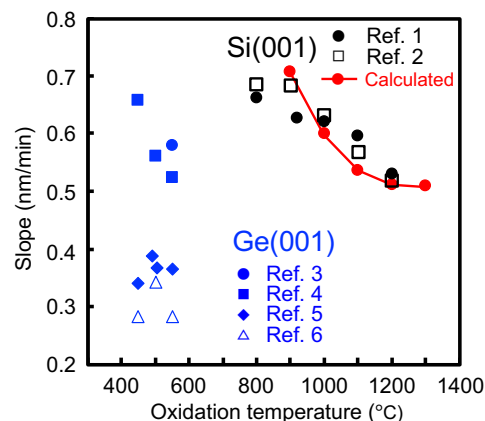


Fig. 2: Slopes of the relationships between d_{ox} and t as a function of the oxidation temperature.