

炭化水素分子イオン注入ウェーハ表面における再結晶化挙動の TCADシミュレーション解析

TCAD Simulation Analysis of Recrystallization Behavior on Hydrocarbon Molecular Ion Implanted Si wafer Surface

株式会社 SUMCO °小林 弘治, 奥山 亮輔, 門野 武, 梶田 亜由美, 廣瀬 諒, 鈴木 陽洋,
古賀 祥泰, 栗田 一成

SUMCO CORPORATION °Koji Kobayashi, Ryosuke Okuyama, Takeshi Kadono, Ayumi Masada,
Ryo Hirose, Akihiro Suzuki, Yoshihiro Koga, and Kazunari Kurita
E-mail: kkobayas@sumcosi.com

1. はじめに

我々のグループでは、高感度 CMOS イメージセンサ(CIS)向けに炭化水素分子イオン注入エピタキシャルシリコン(Si)ウェーハの研究開発をおこなっており、重金属へのゲッタリング能力、注入領域から外方拡散する水素の SiO₂/Si 界面準位欠陥密度低減効果により、CIS の白キズ欠陥、および暗電流を低減できることが明らかとなっている¹⁾。また、過去の研究より、炭化水素分子イオン注入 Si ウェーハの重金属へのゲッタリング能力は、注入ドーズ量の増加によって、さらに向上することがわかっている。しかしながら、高ドーズ量注入条件では、個々の炭化水素分子イオンの注入ダメージが積算されてウェーハ表面に離散的アモルファス領域が形成されるため、エピタキシャル成長時に表面結晶不完全性に起因したエピタキシャル積層欠陥が発生する。そこで、高ドーズ量注入条件においては、注入後にウェーハ表面の再結晶化のために結晶性回復熱処理が必要となり、表面における再結晶化挙動の解析が求められている。これまでの実験では、炭化水素分子イオン注入によって離散的アモルファス領域が形成されたウェーハに対して、急速加熱処理(RTA)をおこない、X線光電子分光分析(XPS)の Si 2p スペクトルのケミカルシフトより、ウェーハ表面の結晶化率変化を導出した。その結晶化率変化に対して、相変態の速度論解析として Kolmogorov-Johnson-Mehl-Avrami (KJMA)の式を用いた考察をおこない、離散的アモルファス領域の再結晶化は、固相エピタキシャル(SPE)成長によって 3 次元的に進行することが示唆されている²⁾。しかしながら、微視的な再結晶化挙動を実験的に明らかにすることは難しい。そのため、本研究では Technology Computer-Aided Design(TCAD)プロセスシミュレータを適用し、表面の離散的アモルファス領域における再結晶挙動を解析した。

2. 計算方法

計算セルは、横幅および奥行きが 80 nm、高さが 800 nm の Si 単結晶として、表面の自然酸化膜厚みを 1.0 nm に設定した。まず、C₃H₅ 分子イオンを注入し、表面に離散的アモルファス領域を形成した。C₃H₅ 分子イオンの注入ドーズ量は 3.0 × 10¹⁵ Carbon atoms/cm²、ドーズレートは 3.0 × 10¹³ Carbon atoms/cm² sec、Tilt 角度は 0° とした。その後、RTA を模擬した結晶性回復熱処理を熱処理温度 600 °Cにて実施し、計算セル表面の離散的アモルファス領域を再結晶化した。再結晶化シミュレーションはアモルファス/結晶界面からの SPE 成長を計算し、その活性化エネルギーは XPS 分析で得られた実験値を用いた。

3. 計算結果

Fig.1 は C₃H₅ 分子イオン注入直後の計算セルであり、ここではイオン注入により発生した原子空孔と格子間 Si 原子の密度が 1.5 × 10²² cm³ 以上の領域をアモルファスと定義し、計算セル内における結晶性の変化を示す。C₃H₅ 分子イオン注入によって内部の埋め込みアモルファス層、および表面の離散的アモルファス領域が形成されていることが確認できる。そして、Fig.2 は、表面の離散的アモルファス領域における再結晶化挙動であり、側面、および底面のアモルファス/結晶界面から 3 次元的に SPE 成長が進行することが明らかとなった。

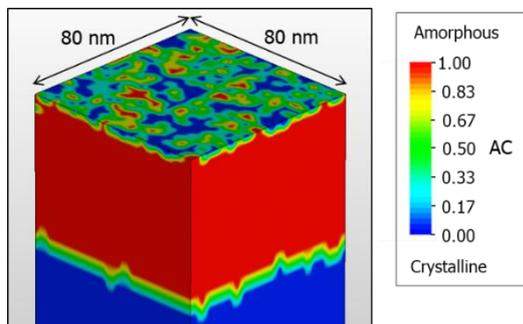


Fig. 1 TCAD simulation cell after C₃H₅ molecular ion implantation.

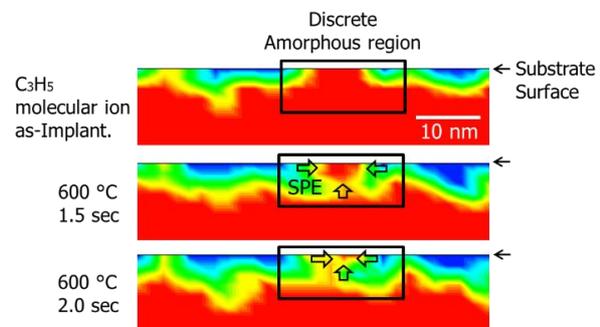


Fig. 2 Cross-sectional image of recrystallization behavior of discrete amorphous region on C₃H₅ molecular ion implanted Si wafer surface after RTA process

【参考文献】

1) K. Kurita *et al.*, *Sensors* **19**, 2073 (2019). 2) K. Kobayashi *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.* **61**, 115501 (2022).