

氏名	坪井秀行
授与学位	博士(工学)
学位授与年月日	平成18年3月24日
学位授与の根拠法規	学位規則第4条第1項
研究科, 専攻の名称	東北大学大学院工学研究科(博士課程) 応用化学専攻
学位論文題目	Tight-Binding 量子分子動力学法に基づく Si デバイスのボロン注入プロセスおよび電気伝導特性に関する研究
指導教員	東北大学教授 宮本 明
論文審査委員	主査 東北大学教授 宮本 明 東北大学教授 浅井 圭介 東北大学教授 滝沢 博胤

論文内容要旨

本研究では半導体 Si デバイスの超高集積化、超高機能化のための微細加工技術において、とくにイオン注入プロセスと電気伝導度の予測に焦点をあて、ナノスケールレベルの加工が要求されているシリコンデバイスのプロセス設計・デバイス設計にコンピュータシミュレーションから設計指針を与える目的で、大規模複雑系に対応した新規な高速シミュレーション手法を開発し、その有効性を実証した。とくに本研究では Tight-Binding 量子分子動力学法に基づいたシリコン基板中への低エネルギーボロン注入プロセスシミュレーションおよび量子古典 Hybrid 分子動力学法に基づいた大規模モデルを用いてのボロンおよび二フッ化ボロン注入プロセスシミュレーションを実現し、注入条件と投影飛程の関係を明らかにすることに成功した。また Tight-Binding 量子分子動力学法により得られたキャリアの存在確率密度分布から電気伝導特性を求める新たな電気伝導度推算シミュレータを開発し、14 族元素単結晶系およびシリコン表面、アルミナ、ハフニアなどの絶縁体や GaN 発光材料の電気伝導特性の予測に成功した。さらに、マクロスケール電気伝導度推算シミュレータを開発し、低エネルギーボロン注入により形成された極浅接合系モデルの電気伝導特性を推算することに成功した。

第1章では、本研究に関する背景と課題および本研究の目的について説明した。現代の情報社会の発展を支える半導体エレクトロニクスにおいて、シリコンデバイスの微細加工はデバイスの高速化と高機能化には不可欠な技術である。特に最も一般的なシリコンデバイスである MOS-FET (Metal Oxide Semiconductor-Field Effect Transistor) の極浅接合層の形成と評価は最も重要な課題の一つであり、その中でも低エネルギーイオン注入プロセスによる極浅接合の形成技術と形成された極浅接合層の電気伝導特性の評価技術は極めて重要な位置を占める。これらの技術においては、現象の把握と解析に原子レベルの知見が必須となるものの現状の実験的手法では十分な情報が得られないことから、コンピュータシミュレーションによる現象の解析と予測が重要な役割を果たすことが期待される。しかし、現状のコンピュータシミュレーションの方法論は必ずしも量子論的現象が支配的となるナノメートルレベルの超微細加工のスケールに対応したのではなく、実用的な計算負荷での量子論に立脚したコンピュータシミュレーションを実現することがプロセス設計・デバイス設計において必要となる。

そこで本研究では、ナノスケールの加工が要求されているシリコンデバイスのプロセス設計・デバイス設計にコンピュータシミュレーションから設計指針を与えることを目的に、大規模複雑系に対応した量子論に基づく新規な高速シミュレーション手法を開発した。

第2章では研究手法としてコンピュータシミュレーションの技法について述べた。とくに計算手法に関して、まず Tight-Binding 量子分子動力学法、および大規模計算のための量子/古典 Hybrid 分子動力学法の特徴について述べた。また Tight-Binding 量子分子動力学計算より得たキャリアの存在確率分布に基づきモンテカルロ法によってキャリアの移動度を評価する手法について述べた。

第3章では、Tight-Binding 量子分子動力学法を用いてシリコン(100)2×1 水素終端面への低エネルギーボロン注入プロセスシミュレーションを行った。図1に100eVで入射させたボロンの軌跡の一例を示す。図1から低エネルギー領域で特に顕著となる特定の方向へ入射ボロンが拡散するチャネリング現象の再現に成功していることがわかる。さらに入射ボロンの運動エネルギーと拡散方向の関係を調べた結果を図2に示す。図2からボロンは拡散方向を変化させる時に運動エネルギーを大きく減衰させており、格子シリコンの核阻止能が入射ボロンの停止に重要な役割を果たしていることがわかった。また、入射ボロンの到達深さに及ぼす傾斜角と回転角の影響を調べた結果、実験から良く知られている1 keV以上の高エネルギー注入の場合と同様に、100 eVの低エネルギー注入においても傾斜角7°でのボロン注入が極浅接合形成に有効であることを明らかにした。

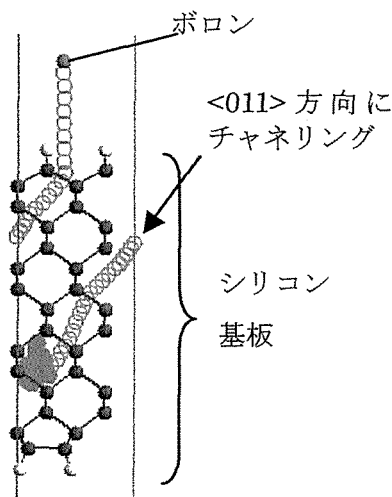


図1 シリコン(100)2×1表面へ100 eVで注入されたボロンの軌跡

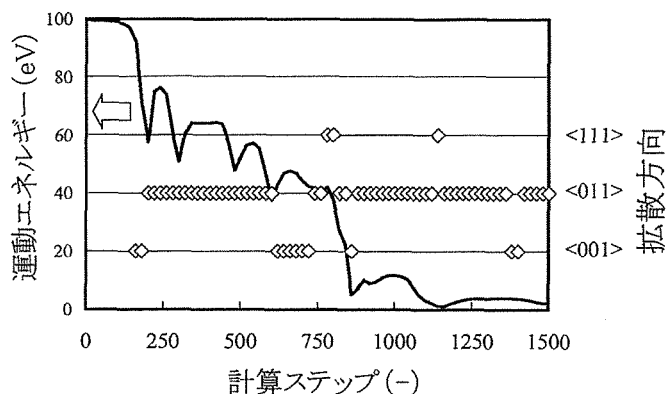


図2 入射ボロンの運動エネルギーと拡散方向

第4章では、実際の接合深さである数百Åレベルのシミュレーションを実現するため、量子/古典 Hybrid 分子動力学法によるボロン注入シミュレーションを行った。入射エネルギー1 keVにおける入射ボロンの軌跡の一例を図3に示す。図3より、従来の計算手法では計算負荷が過大で実現不可能であった大規模モデルのシミュレーションが本手法により実現可能であることが示された。入射ボロンの停止はチャネリング中の入射ボロンと格子シリコン間の電子的な相互作用よりも、入射ボロンが格子シリコンと衝突して運動エネルギーを失う原子間の相互作用の方が大きく影響していることがわかった。

この傾向は第3章でシミュレーションを行った100 eVの場合と同じであり、入射エネルギー

1 keV においても入射ボロンの停止は格子シリコンの電子阻止能よりも核阻止能が支配的となっていることがわかった。さらに同一入射エネルギーでのボロン注入プロセスと二フッ化ボロン注入プロセスのシミュレーションを行ったところ、二フッ化ボロン注入の場合には、ボロン単独注入の場合に比べてボロン原子が有するエネルギーが実質上小さいため、運動エネルギーの減少が早く、浅い接合が形成されることが示唆された。

第5章では、Tight-Binding 量子分子動力学法により求めた各分子軌道毎のキャリアの存在確率の空間分布に基づいて、大規模複雑系における電気伝導度を推算する新規な手法の開発を行った。従来半導体中のキャリアの有効質量をバンド構造から求める手法では、運動量空間が定義できないため不純物を含む系やアモルファスなどには対応できない。そこで不純物が注入された極浅接合などデバイスの電気伝導特性を評価するために、Tight-Binding 量子分子動力学法により求めた各分子軌道毎のキャリアの存在確率の空間分布に基づいて、大規模複雑系における電気伝導度を推算する新規な手法の開発を行った。

計算手法の模式図を図4に示す。開発したシミュレータの検証試験を14族元素のダイヤモンド構造単結晶モデルを用いて行ったところ、表1に示したように実験結果を良く再現する結果を得ることに成功した。

第6章では、前章で開発した電気伝導度推算シミュレータを金属タンタル-酸化タンタル界面系に適用した。図5に、金属タンタル-酸化タンタル界面モデルにおいて最も電気を流しやすい性質を示したLUMO（最低非占有軌道）+5番目の分子軌道と最も電気を流しにくい性質を示したLUMO+12番目の分子軌道のキャリア密度の空間分布を示す。電気を流しにくい分子軌道は金属タンタル近傍に局在化しているのに対し、電気を流しやすい分子軌道はモデル全体に分布しておりキャリアの伝播経路が形成されていることがわかる。本手法により複雑な原子構造を有する系の電気伝導特性が評価できることがわかった。また、これ以外にもシリコン単結晶（100）清浄表面モデル、シリコン-シリコン酸化膜界面モデルのほか、シリコンデバイスを構成する酸化ハフニウム、酸化アルミニウムなどの絶縁材料や発光材料である窒化ガリウムなどにも適用し、

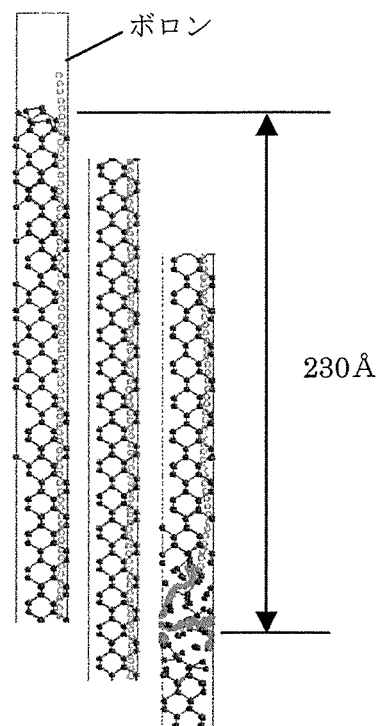


図3 量子/古典 Hybrid 分子動力学シミュレーションでの入射ボロンの軌跡

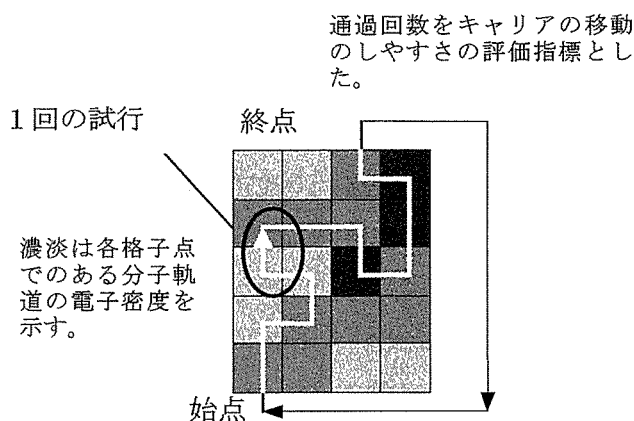


図4 電気伝導推算シミュレータの計算手法の模式図

その有効性を明らかにした。

第7章では、実際のサブミクロンレベルのシリコンデバイスの電気伝導特性の高速なシミュレーションを実現する目的で、モンテカルロ法を用いる新たなマクロスケール電気伝導シミュレータの開発を行った。開発したシミュレータは、対象とする物質系を仮想的な抵抗成分からなる電気回路網として近似

し、系の電気伝導特性を仮想電気回路網の電気伝導度として評価する。シリコン-シリコン酸化膜界面の電気伝導度推算シミュレーションを行い、シリコン酸化膜から構成される絶縁膜部分は電気伝導度が小さく、シリコンから構成される部分では電気伝導度が大きいことが示され、量子論に立脚したマクロスケールの電気伝導特性をシミュレーションすることに成功した。

第8章では本研究の総括を述べた。シリコン半導体デバイスは現在も微細加工による高集積化と高機能化を目指して精力的な研究開発が進められている。とくに MOS-FET 作製に

おける微細加工は最先端の技術が要求される分野であり、極浅接合形成によるデバイスサイズの縮小とショートチャネル効果抑制のための電気伝導特性の制御が求められている。しかしながらいずれの技術においてもデバイスのサイズがナノメートルレベルになるにつれて実験の精度にも問題が多くなるとともにコンピュータシミュレーションによるプロセス設計、デバイス設計に関しても量子論的效果を考慮する必要に迫られ、現実的な計算コストで的確な情報を得ることが困難となっている。そこで、本研究ではコンピュータシミュレーションによるナノスケールシリコン MOS-FET デバイスの微細加工プロセス設計、デバイス設計に焦点を当て、極浅接合形成のための低エネルギーイオン注入プロセスの Tight-Binding 量子分子動力学シミュレーションおよび極浅接合層の電気伝導特性制御のための Tight-Binding 量子分子動力学法に基づいた電気伝導シミュレータの開発を行った。その結果、シリコン MOS-FET デバイスの極浅接合形成における最重点課題であった現実的な計算コストでの量子化学的手法に立脚したコンピュータシミュレーションにより極浅接合の実現に向けてに設計指針を与えることができた。

表1 14族元素単結晶モデル(スズ、ゲルマニウム、シリコン、ダイヤモンド)およびグラファイトの電気伝導度推算結果

	電気伝導度	
	計算結果 (S/cm)	実験値 (S/cm)
スズ	1.6×10^5	0.9×10^5
ゲルマニウム	1.9×10^{-2}	1.9×10^{-2}
シリコン	4.3×10^{-6}	4.3×10^{-6}
グラファイト	0.69×10^5	$\sim 10^5$
ダイヤモンド	5.5×10^{-32}	$\sim 10^{-16}$

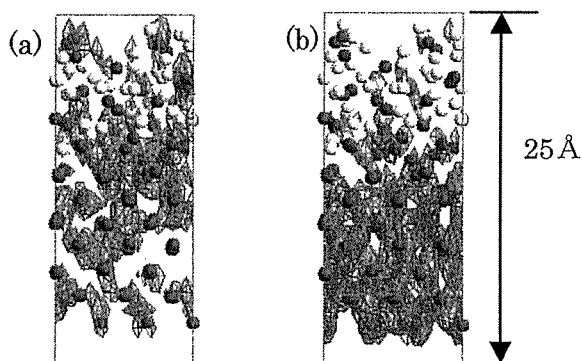


図5 最も電気を流しやすい性質を示した LUMO+5 番目の分子軌道 (a)、および最も電気を流しにくい性質を示した LUMO+12 番目の分子軌道(b)のキャリア密度の空間分布(●タンタル、●酸素)

論文審査結果の要旨

本研究では半導体シリコンデバイスの微細加工技術において、とくにイオン注入プロセスと電気伝導度の予測に焦点をあて、シリコンデバイスのプロセス・デバイス設計にコンピュータシミュレーションから設計指針を与える目的で、大規模複雑系に対応した新規な高速シミュレーション手法を開発し、その有効性を実証した。

本論文は「Tight-Binding 量子分子動力学法に基づく Si デバイスのボロン注入プロセスおよび電気伝導特性に関する研究」と題し、以下の8章から成り立つ。

第1章では、半導体微細加工とくに MOS-FET (Metal Oxide Semiconductor - Field Effect Transistor) における極浅接合形成と評価の重要性について説明し、低エネルギーイオン注入および電気伝導特性予測に関する既往の研究をまとめ、本論文の目的について述べている。

第2章では、Tight-Binding 量子分子動力学法および量子古典 Hybrid 分子動力学法の理論的背景について述べるとともに、Tight-Binding 量子分子動力学により求めたキャリアの存在確率密度に基づいて系の電気伝導度を推算する新たに開発したシミュレータについて説明している。

第3章では、Tight-Binding 量子分子動力学法を用いて、低エネルギーボロン注入プロセスシミュレーションを行い、100eV の低エネルギー注入において入射ボロンは主に格子シリコンとの衝突により運動エネルギーを失い停止すること、および傾斜角 7° の場合に最も浅い投影飛程が得られることを明らかにした。

第4章では、量子古典 Hybrid 分子動力学シミュレーションにより入射エネルギー1000eV、到達深さ 230 Å のボロン注入プロセスシミュレーションに成功した。その結果、入射エネルギー1000eV のレベルで既に入射ボロンは格子シリコンの核阻止能により停止する傾向を示すことが明らかにした。また、二フッ化ボロン注入シミュレーションを行い、ボロン原子単独の場合よりも早い段階でボロンは運動エネルギーを失い浅い接合が形成されることを明らかにした。

第5章では、形成した極浅接合の評価のため、Tight-Binding 量子分子動力学法により得られたキャリアの存在確率分布に基づいて系の電気伝導度をモンテカルロ法で推算する新しい電気伝導度推算シミュレータを開発し、14 族元素単結晶系に適用し実験結果を良く再現する計算結果を得ることに成功した。

第6章では、前章で開発した電気伝導度シミュレータをシリコン表面系、窒化シリコン、アルミナ、ハフニアなどの絶縁膜系および GaN 発光材料に適用し、本手法がアモルファスなどを含む多様な系の電気伝導度の推算に有効な手法であることを明らかにした。

第7章では、実デバイスのスケールでの電気伝導特性の高速なシミュレーションを可能にする方法論を開発するため、対象とする物質系を仮想的な電気回路網として表現し、この電気伝導度を評価するためにモンテカルロ法を用いる新たなマクロスケール電気伝導シミュレータの開発を行った。さらにこの手法をシリコン-シリコン酸化膜界面モデルに適用し、本手法により原子レベルの量子論的知見に基づいてマクロスケールの電気伝導特性を推算できることを明らかにした。

第8章は、本論文の総括である。

以上、本論文は半導体 Si デバイスの微細加工技術に焦点を当て Tight-Binding 量子分子動力学法に基づいた極浅接合形成と評価のための低エネルギーイオン注入プロセスシミュレーション手法および電気伝導度推算シミュレーション手法の開発し、コンピュータシミュレーションから極浅接合の実現に向けて設計指針を与えることに成功した。

よって、本論文は博士(工学)の学位論文として合格と認める。