706 ULSI セル内に蓄積する転位のデバイス寸法依存性に関する数値的評価

Numerical Evaluation for Scale Dependency of Dislocation Accumulation in ULSI Cells

○正 佐藤 満弘 (北見工大) 正 大橋 鉄也
丸泉 琢也 (武蔵工大) 北川 功 (日立基礎研)

Michihiro SATO, Tetsuya OHASHI, Kitami Institute of Technology, Koencho 165, Kitami Hokkaido
Takuya MARUIZUMI, Musashi Institute of Technology, Setagayaku Tokyo
Isao KITAGAWA, A.R.L., Hitachi Ltd., Higashi-koigakubo Kokubunji Tokyo

Key Words : ULSI, Shallow trench isolation, dislocation, crystal plasticity analysis, finite element method

1. 結 言

著者らは、半導体素子構造として広く使われている浅溝分離型 (Shallow Trench Isolation type, STI 型と省略する) ULSI セルについて、シリコン酸化膜形成過程で生ずる変形の結晶塑性解析を行った⁽¹⁾。また、転位発生の原因としてデバイスの冷却過程で生ずる塑性すべり変形が重要な役割をはたしていることより、シリコンの温度依存性を考慮し、デバイス内で熱変形により発生する転位のシミュレーションを行った。そして蓄積される転位の構造と量について検討した⁽²⁾。これらの解析では、ゲート長が、 $L_g = 62 \text{ nm}$ のデバイスモデルを用いて解析を行ってきた。しかし、現在では、 $L_g = 45, 32 \text{ nm}$ のデバイスサイズが量産化の対象となり、開発が行われている。本研究では、次世代の ULSI を対象とし、ゲート長とトレンチ深さの寸法が異なるデバイスのモデルを作成し、結晶塑性解析を用いて、冷却過程で発生する転位の蓄積シミュレーションを行う。そして、転位とデバイス構造の寸法依存性について検討する。

2. 解析モデルの作成

STI 型 ULSI セルの周期的に繰り返される構造の 1 周期分を取り出したモデルを図 1 に示す。このモデルは、ゲート長が 62 nm のデバイスである。構造は、①～④で成り立つ。①～③は、それぞれ、埋め込み酸化膜、ゲート電極、ソース・ドレイン電極であり、材料は SiO_2 を用いた。④はシリコン基板である。素子機能は、②、③の電極と接しているシリコン基板の凸部分に形成され、デバイス性能を左右する重要な領域 (以下素子機能形成領域と称する) である。結晶方位は、Si 基板法線方向が $[100]$ 、STI 構造のトレンチ方向が $[01\bar{1}]$ となる様に作成した。この解析モデルをベースとして、デバイスの幅のみ縮小し、ゲート長が $L_g = 45, 32 \text{ nm}$ 、また、トレンチ深さ $T_r = 850, 700, 550, 400 \text{ nm}$ と異なる解析モデルを作成した。六面体八節点要素で要素分割を行った解析モデルを図 2 に示す。要素分割を行う際には、トレンチ深さなどが異なっても各モデルの素子機能形成領域とトレンチ底付近の要素サイズがほぼ一致するように分割を行い、解析では、節点数 7128、要素数 5088 のモデルを使用した。

3. 結晶塑性解析

解析には有限要素法をベースにした結晶塑性解析システム CLP^{(3),(4)}を用いた。モデルに生じる塑性すべり変形を解析し、応力分布、結晶の 12 の $\langle 111 \rangle$ $\langle 110 \rangle$ すべり系に発生する塑性せん断ひずみ、塑性せん断ひずみの空間勾配に伴う幾何学的に必要な転位 (GN 転位) 等を求める。

それぞれの解析モデルに対し、初期温度 1000°C から徐々

に温度が降下する場合について解析を行った。

表 1 に解析に用いた材料物性値を示す。Si の硬さに対する温度依存性は、表 1 に示すように Si の格子摩擦応力に温度依存性を与えることにより再現した⁽²⁾。

モデルの境界条件は、Z 方向に垂直な前後両面の節点は Z 方向に変位しないよう拘束条件を与え、X 軸に垂直な左右両側面の節点には、周期境界条件を与えた。

Fig.1 (a) Schematic illustration of the periodic structure of the STI type ULSI cells. (b) Base Model employed for the crystal plasticity analysis.

T_r L_g	850	700	550	400 (nm)
62	A1	A2	A3	A4
45	B1	B2	B3	B4
32 (nm)	C1	C2	C3	C4

Fig.2 Models employed for the numerical analysis.

Table. 1 Material data for SiO₂ and Si.

Material	Elastic compliances [10 ⁻¹¹ m ² /N]		
Si	S ₁₁ = 0.7685	S ₁₂ = -0.2139	S ₄₄ = 1.2563
SiO ₂	S ₁₁ = 1.3698	S ₁₂ = -0.2327	S ₄₄ = 3.2051

Material	Thermal expansion coefficient [1/K]
Si	2.50 × 10 ⁻⁶
SiO ₂	0.35 × 10 ⁻⁶

Temperature [°C]	24	100	200	400	600	800	1000
Material	Lattice friction stress [MPa]						
Si	306	294	279	168	78	30	30
SiO ₂	10.0 × 10 ³						

4. 解析結果

初期温度 (1000 °C) から温度が降下すると, 12 のすべり系のうち 8 つのすべり系に転位が生じた. これら 8 つのすべり系のうち No.01,03,04,06 と No.07,09,10,12 は, それぞれ同類の二つの転位構造をもつ. 以下では, (111) [110] すべり系に生じた GN 転位について検討する.

図 3 は, 図 2 で示したモデルが 700 °C の時に生じた GN 転位を示している. 表示された線が長く太いほど高い密度の転位が発生していることを示し, 線の方向は, 転位線の方角と一致するように表示した. また, $\|\rho_o\|_{\max}$ は, モデル内に生じた最大転位密度の値, ●は, その位置を示している. デバイス内に生ずる転位は, 素子機能形成領域の右肩部 (上部) と左トレンチ底 (下部) から素子内部方向にそれぞれ広がる半ループ型構造になっている. トレンチ深さが浅くなる (1 → 2 → 3 → 4) と転位は, 素子機能形成領域から内部方向へと発生領域が広がって行く. 最大転位密度の発生する位置もトレンチ底から素子機能形成領域へと移動していき, このような転位発生はデバイス動作の大きな弊害になると考えられる.

図 4 は, 素子機能形成領域に生じた転位の線長 (転位密度 × 要素体積) を足し合わせた総転位線長 (tld) とトレンチ深さの関係を示している. トレンチが浅くなると tld は増加する. このことは, 図 3 で示したように転位の発生する領域が広がることに対応する. また, 同じトレンチ深さでゲート長が短くなる ($L_g = 62 \rightarrow 45 \rightarrow 32$) と tld は, 減少する. このことは, 図 2 で示されているように, ゲート長が短くなると (A → B → C) 素子機能形成領域での転位の発生が減少するために tld も減少する. しかし, トレンチ深さが不十分な A4 → B4 → C4 の場合, 最大転位密度の値は, $\|\rho_o\|_{\max} = 1.23 \times 10^{13} \rightarrow 2.03 \times 10^{13}$ と 1.7 倍高くなっている. このことより, 素子機能形成領域に生ずる転位は, ゲート長の微細化により転位量は減少するが, トレンチに十分な深さが無い場合には, 転位の密度は高くなると言える.

5. 結 言

温度降下により STI 型 ULSI セル内に生ずる転位をデバイスのゲート長とトレンチ深さの寸法をパラメータとし, 結晶塑性解析の手法を用いて解析した. その結果, ゲート長が短くなる場合, トレンチ深さが浅くなる場合には, 高い密度の転位が素子機能形成領域に生ずることが解った.

Fig. 3 GN dislocations which accumulate on the (111) [110] slip system when the temperature is 700 °C.

Fig.4 Total length of dislocations at each depths of trench in the devices.

参考文献

- (1) Ohashi, T., Sato, M., Maruizumi, T., Kitagawa, I., Appl. Surface Science., 216(2003), 340
- (2) Sato, M., Ohashi, T., Maruizumi, T., Kitagawa, I., Key Engineering Materials, 324-325(2006), 1035
- (3) Ohashi, T., Phil. Mag. Lett., 75(1997), 51.
- (4) Ohashi, T., Int. J. Plasticity, 21(2005), 2071.