

## 不純物がドーピングされた ULSI セルに生ずる転位の結晶塑性解析\*

佐藤 満 弘<sup>\*1</sup>, 大橋 鉄 也<sup>\*2</sup>  
丸 泉 琢 也<sup>\*3</sup>, 北川 功<sup>\*4</sup>Crystal Plasticity Analysis of Dislocation Accumulation  
in Impurity Doped-ULSI CellsMichihiro SATO<sup>\*5</sup>, Tetsuya OHASHI,  
Takuya MARUIZUMI and Isao KITAGAWA<sup>\*5</sup> Department of Mechanical Engineering, Kitami Institute of Technology,  
165 Koen-cho, Kitami-shi, Hokkaido, 090-8507 Japan

Several atomic level problems such as uneven oxidation film or generation of lattice defects take place in the fabrication processes of nano-meter order devices. Among them, dislocation accumulation is a serious problem. Generation and accumulation of dislocations are known to take place during the cooling processes of device fabrication due to its thermo-plastic deformation. Dislocations accumulated in the electron channel have an enormous effect on the electronic state of the device, increase the signal delay and obstruct devices from normal operation. Therefore, it is important to understand the deformation and the dislocation accumulation for the fabrications of nano-meter order devices. On the other hand, impurity doping is an indispensable process for the device fabrication, and also important in dislocation accumulation. In this study, we make numerical models of ULSI cells where impurities are doped at some limited areas. Dislocation accumulation in the models during cooling processes of device fabrication is analysed by employing a technique of crystal plasticity analysis and evaluate the thermal stress, plastic slip deformation and accumulation of dislocations when the temperature drops from the initial value of 1000°C. Possibilities for the control of dislocation accumulation in impurity doped-ULSI cells are discussed.

**Key Words:** ULSI, Dislocation, Impurity Doping, Crystal Plasticity Analysis, Finite Element Method

## 1. 結 言

情報機器における高密度メモリーや高速演算チップは、半導体技術ロードマップに示されているように、LSI 素子の微細化と高集積化により高性能化が図られている。現段階での LSI 素子の代表寸法は数十ナノメートルに達しており、ナノスケール構造となる半導体素子の量産化に向けた製造プロセスの確立が急務である。しかしながら、このような超微細化された半導体に関して、従来行われてきた製造プロセスや材料を適用することが出来ず大きな壁となっている。その原因として、ナノスケールデバイスの生産過程で生ずる不均一な酸化膜の形成や異相界面付近に生ずる結晶欠陥など原子レベルでの諸問題がある。結晶欠陥の中で特に転位の発生は、素子中のチャンネルを移動する電子の状態に大きな影響を与え、正常なデバイス動作を阻害

する。次世代ナノスケールデバイスの量産化に向けたデバイス構造の設計・開発では、転位発生部位の特定と構造の解明、転位発生の制御が極めて重要である。

浅溝分離型 (Shallow Trench Isolation type, STI 型と省略する。) ULSI セルは、最新のナノスケールデバイス構造として一般に用いられている。STI 型 ULSI セルは通常、少なくとも数段階以上のプロセスを経て製造されるが、これらのうち転位発生は、浅溝の形成された Si 基板を 1000°C 程度に昇温したうえで溝領域を SiO<sub>2</sub> で埋め込みを行い室温まで降温するプロセスにおいて生ずるものと推定されている。しかしこの間、どのように転位が発生しそれがどのように広がってゆくかなどの詳細については十分理解されていない。

著者らはこれまで、Si 領域を不純物ドーピングのない純粋で一樣な物質であると仮定した上で Si と SiO<sub>2</sub> からなる STI 型 ULSI セルの数値モデルを作成し、その熱変形を結晶塑性解析の手法を用いて検討してきた。その結果、セル中に蓄積する平均転位密度が、セル寸法の微細化とともに増加する現象を明らかにし<sup>(1)</sup>、転

\* 原稿受付 2009年2月5日。

<sup>\*1</sup> 正員, 北見工業大学機械工学科(〒090-8507 北見市公園町165)。<sup>\*2</sup> 正員, フェロー, 北見工業大学機械工学科。<sup>\*3</sup> 武蔵工業大学電気電子工学科。<sup>\*4</sup> (株)日立製作所基礎研究所(〒185-8601 国分寺市東窓ヶ窪1-280)。

E-mail: sato@newton.mech.kitami-it.ac.jp

位の発生し始める温度と発生箇所および、室温まで降温した際に蓄積される転位量と蓄積転位の性質や分布の形態について詳細な検討を行ってきた<sup>(2),(3)</sup>。一方、デバイスの電気的特性発現のために不純物ドーピングは欠かすことが出来ないが、不純物をドーピングすると転位の移動度も大きく変化することが知られており<sup>(4)</sup>、不純物がドーピングされた状態でのセルの転位蓄積についても調査する必要がある。

本研究では、STI 型 ULSI セル中の転位発生に対する不純物ドーピングの影響を検討するために、ULSI セルの Si 領域の一部分に不純物ドーピングを行った解析モデルを作成し、結晶塑性解析を用いてデバイスの冷却過程で生じる転位の蓄積について検討する。

## 2. 解析モデル

STI 型 ULSI セルの周期的に繰り返される構造と、その 1 周期分を取り出したモデルを図 1(a) に示す。図 1(b) は、ゲート長が 62 nm のデバイスを参考にして作成した解析モデルである。デバイスは、①～⑤の構造から成り立つ。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、本モデルでは材料を SiO<sub>2</sub> とした。Si 基板⑤の上部にある素子機能形成領域部に不純物ドーピング領域④を設定した。その領域の形状を図 1(c) に示す。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 [011] となる様に作成した。解析には、六面体八節点要素で要素分割を行い、節点数 4446、要素数 2812 のモデルを用いた。図 2 に要素分割したモデルを示す。

## 3. 結晶塑性解析

解析にはひずみ勾配結晶塑性解析の手法を用いた。一般に材料中に蓄積される転位には、統計的に蓄積される転位 (SS 転位) と幾何学的に必要な転位 (GN 転位) の 2 種類あるが、本研究では、GN 転位について解析を行った。GN 転位は、あるすべり系に生じた塑性せん断ひずみの分布に空間的な勾配があったとき、そこに導入されなければならない転位であり、Ashby は、GN 転位密度が塑性せん断ひずみの勾配に比例する関係を一次的に式(1)で示した<sup>(5)</sup>。

$$\rho_G \cdot \tilde{b} = -\frac{\partial \gamma}{\partial \xi} \quad (1)$$

ここで、 $\rho_G$  は GN 転位密度、 $\gamma$  は塑性せん断ひずみ、 $\tilde{b}$  はバーガースペクトルの大きさ、 $\xi$  はすべり方向座標である。三次元空間においては、一般に転位は刃状

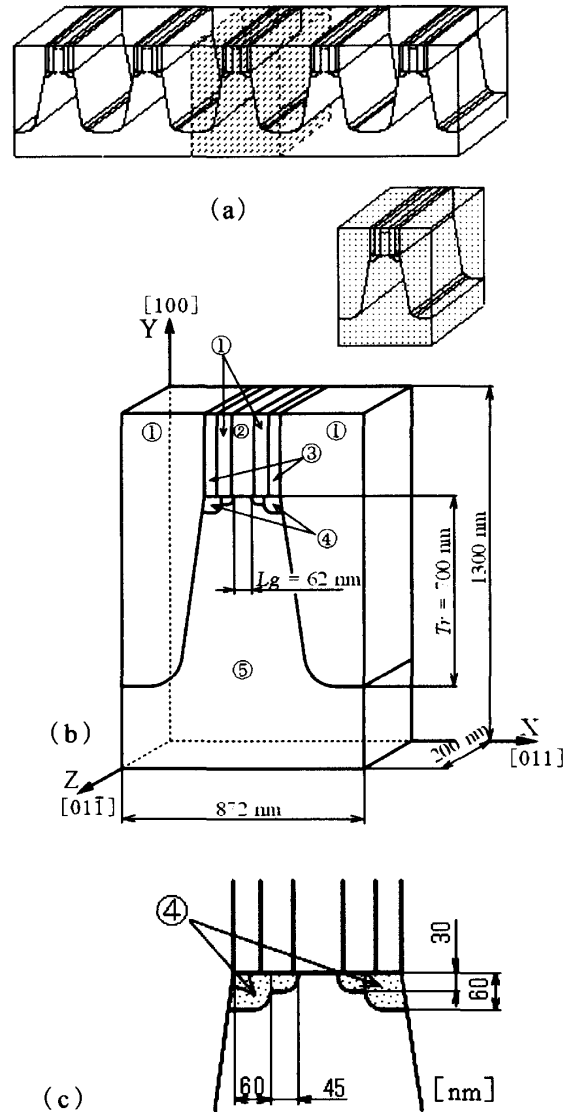


Fig.1 (a) Schematic illustration of the periodic structure of the STI type ULSI cells. (b) Model employed for the crystal plasticity analysis. (c) Shape and dimension of the impurity doped areas.



Fig.2 Finite element meshing employed for the numerical analysis.

転位とらせん転位から成り、すべり系番号を  $n$ 、 $\xi$  をすべり方向に垂直な座標とすると転位の刃状成分密度  $\rho_{G,edge}^{(n)}$  とらせん成分密度  $\rho_{G,screw}^{(n)}$  は、次式で表される<sup>(6),(7)</sup>。

$$\rho_{G,edge}^{(n)} \cdot \tilde{b} = -\frac{\partial \gamma^{(n)}}{\partial \xi^{(n)}} \quad (2)$$

$$\rho_{G,screw}^{(n)} \cdot \tilde{b} = \frac{\partial \gamma^{(n)}}{\partial \xi^{(n)}} \quad (3)$$

式(2), (3)より GN 転位密度の大きさは式(4)で、バーガスベクトルと転位線のなす角すなわち特性角度  $\phi$  は、式(5)で与えられる<sup>(6)</sup>。

$$\|\rho_G^{(n)}\| = \sqrt{(\rho_{G,edge}^{(n)})^2 + (\rho_{G,screw}^{(n)})^2} \quad (4)$$

$$\sin \phi = \frac{\rho_{G,edge}^{(n)}}{\|\rho_G^{(n)}\|}, \quad \cos \phi = \frac{\rho_{G,screw}^{(n)}}{\|\rho_G^{(n)}\|} \quad (5)$$

臨界分解せん断応力  $\theta^{(n)}$  は、式(6)で表される修正 Bailey-Hirsch モデル<sup>(6)</sup>を用いた。

$$\theta^{(n)} = \theta_0(T) + \sum_{m=1}^{12} \Omega^{(nm)} a \mu \tilde{b} \sqrt{\rho_s^{(m)}} \quad (6)$$

ここで、右辺第 1 項の  $\theta_0(T)$  は格子摩擦応力であり、右辺第 2 項の  $\Omega^{(nm)}$  は相互作用行列、 $a$  は数値係数、 $\mu$  はせん断弾性係数、 $\rho_s^{(m)}$  はすべり系  $m$  に蓄積した SS 転位密度で結晶中の 12 のすべり系に蓄積した転位による潜在硬化を表している。本解析では簡単のため格子摩擦応力の温度依存性は無く、ドーピングされた不純物の種類と量のみによって変化するものとする。また通常、デバイス製造に使用される Si 材料は初期において無転位の状態であるため、 $a \approx 0$  として解析を行った。したがって各すべり系の臨界分解せん断応力は変形中一定値を保つ。

数値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<sup>(6),(7)</sup>を用いた。モデルに生ずる塑性すべり変形を解析し、応力分布と結晶の 12 の  $\{111\}\langle 110 \rangle$  すべり系に生ずる塑性せん断ひずみより式(4), (5)で与えられる GN 転位密度と特性角度を求め、GN 転位の分布と構造について解析する。

半導体製造に使われる不純物の種類やドーピング量などは多岐にわたるが、ドーピングによる材料物性への影響の詳細は不明な点が多い。米長らは、シリコン母材に Ge や B 元素を単独ドーピングした場合では転位の移動度が増加し、Ge と B の両者をドーピングした場合は減少することを実験的に示している<sup>(4)</sup>。不純物ドーピングによる転位の移動度の変化は、より巨視的にはすべり系の臨界分解せん断応力の変化をもたらすものと考えられる。このため本研究では不純物ドーピングの影響を式(6)第 1 項の格子摩擦応力を変化させることで表現する。解析では、図 1 に示した④の領域内の不純物ドーピング量が一定であり、この領域内の転位の運動に対する格子摩擦応力が Si のその値から変化するものとし、④の格子摩擦応力を Si の格子摩擦応力 (30MPa) を基に、-30% ~ +30% の範囲で変化させて計算した。表 1 に解析に用いた SiO<sub>2</sub> と Si の材料物性値<sup>(8),(9)</sup>を示す。

解析モデルの幾何学的境界条件は、X 方向の繰り返し周期に比べ Z 方向の長さは十分長いので、Z 方向の変位はほぼ 0 と考えることが出来る。よって、Z 方向に垂直な前後両面上の節点は、Z 方向に変位しないよう拘束条件を与えた。また、X 軸に垂直な左右両側面は、変形後においても X 軸に垂直な平面を保ち変形するよう各節点の変位の境界条件を与えた。デバイスの初期温度を 1000°C とし、徐々に温度が低下する場合について計算した。

Table 1 Material data for SiO<sub>2</sub> and Si.

Material	Elastic compliances [10 <sup>-11</sup> m <sup>2</sup> /N]		
	S <sub>11</sub>	S <sub>12</sub>	S <sub>44</sub>
SiO <sub>2</sub>	1.3698	-0.2327	3.2051
Si	0.7685	-0.2139	1.2563

Material	Thermal expansion coefficient [1/K]
	SiO <sub>2</sub>
Si	2.50×10 <sup>-6</sup>

Material	Lattice friction stress [MPa]
SiO <sub>2</sub> (area ①~③)	10.0×10 <sup>3</sup>
Si (area ⑤)	30.0
Si + impurity (area ④)	21 (-30%) ~ 39 (+30%)

## 4. 解析結果

初期温度 1000°Cから温度が低下すると、Si と SiO<sub>2</sub> の線膨張係数が約 7 倍違うことより、Si 基板と SiO<sub>2</sub> の埋め込み酸化膜との界面の近傍で熱応力が発生する。また、SiO<sub>2</sub> の格子摩擦応力は表1に示すように非常に高い値とすることにより、粘性挙動は無視し弾性体と仮定した。よって、Si 領域内に塑性すべりによる変形が生ずる。特に素子機能形成領域の上部とトレンチ底の左右4ヶ所で応力集中が生じ塑性変形に至る。そして、この4ヶ所の部分を中心に転位が発生する。ドーピング量やドーパントによらず、12のすべり系のうち8つのすべり系で転位が生じた。発生した転位は、2種類の空間構造を有し、表2に示す4つのすべり系で生じる転位構造をAタイプ、同様に表3のものをBタイプとする。

Table 2 Slip system on which dislocations of A type accumulate.

No.	Slip plane normal direction	Slip direction
01	(111)	[1 $\bar{1}$ 0]
03	(111)	[10 $\bar{1}$ ]
04	( $\bar{1}$ 11)	[110]
06	( $\bar{1}$ 11)	[101]

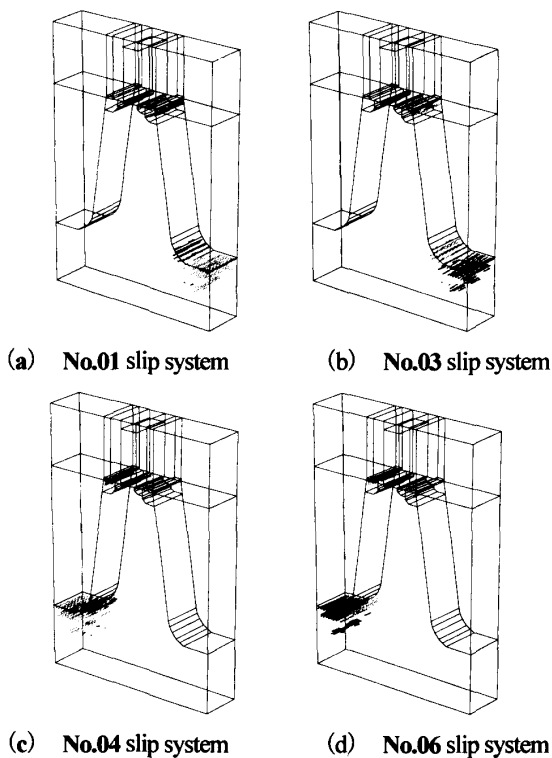


Fig.3 GN dislocations which accumulate on the No.01, 03, 04 and 06 slip systems when the temperature is 700 °C.

図3, 4 はドーピングを行っていない場合について、GN 転位が生じた各すべり系の転位構造を示した図である。これらの図では、式(4), (5)より求めたGN 転位密度と特性角度の値より各要素内に蓄積したGN 転位の長さや方向を求め、その長さや方向の直線上の線分を要素重心の箇所に表示した<sup>(6)</sup>。表示した線が長いほど密度の高い転位が発生しており、線の方向は蓄積した転位線の方向と一致する。この可視化により、GN 転位構造、分布、密度の大きさを同時に3次元で把握することが出来る。図3に示すAタイプの転位構造は、転位線がデバイスの素子分離溝に平行でZ軸方向に伸張する構造である。すべり系No.01と03では、右トレンチ底の下部に転位が生じ、すべり系No.04と06では、これと対称な位置に生ずる。また、これらの転位は特性角度が60°となる混合転位が最も多く生じている。

Table 3 Slip system on which dislocations of B type accumulate

No.	Slip plane normal direction	Slip direction
07	(1 $\bar{1}$ )	[1 $\bar{1}$ 0]
09	(11 $\bar{1}$ )	[101]
10	( $\bar{1}$ 11)	[110]
12	(1 $\bar{1}$ 1)	[10 $\bar{1}$ ]

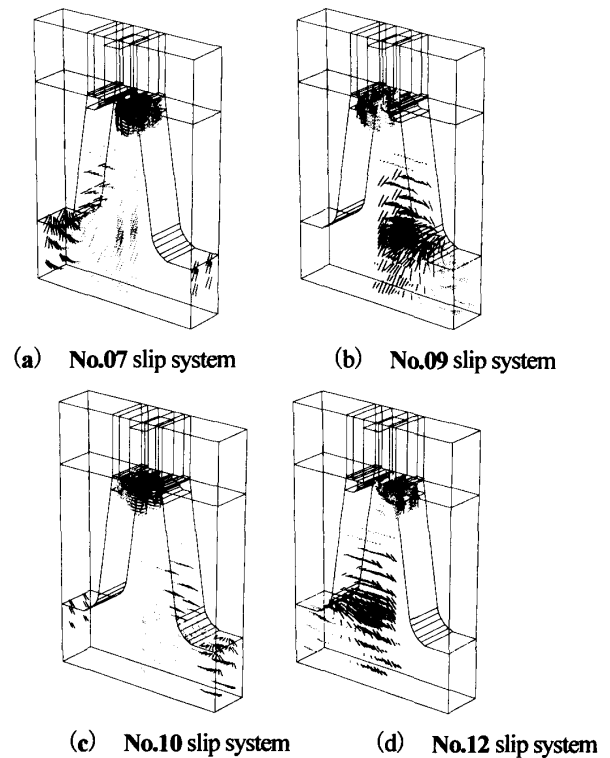


Fig.4 GN dislocations which accumulate on the No.07, 09, 10 and 12 slip systems when the temperature is 760 °C.

図4に示すBタイプの転位構造は、素子機能形成領域とトレンチ底から発生し、デバイスの内部方向に広がる半ループ型構造の転位である。すべり系 No.07 と 12 では、左トレンチ底部と素子機能形成領域の右肩部に転位が生じ、すべり系 No.09 と 10 では、これと対称な位置に生ずる。また、特性角度は、 $30^\circ$  と  $60^\circ$  の混合転位が最も多く生じている。

図5は、デバイスの温度が  $760^\circ\text{C}$  の時にすべり系 No.07 に生じた GN 転位密度の大きさを、ドーピング領域 (図1(c)) の格子摩擦応力を  $21 \sim 39 \text{ MPa}$  と変化させた場合について比較した図である。図中の  $\|\rho_G\|_{\text{ave}}^U$  は(a)に示した破線より Si 基板を上下に分割した時の上部に生じた平均転位密度の値である。(a)は不純物ドーピングが無いとした場合、すなわち図1の④と⑤を同じ Si とし、格子摩擦応力を Si の  $30 \text{ MPa}$  とした場合である。(b), (c), (d)は、その値が  $30 \text{ MPa}$  以下の場合で、ドーピング領域の格子摩擦応力が低下した状態を想定した。(b)  $\rightarrow$  (c)  $\rightarrow$  (d)と格子摩擦応力が小さくなるとドーピング領域は非ドーピング領域に比較して塑性変形が生じやすい状態となるためにドーピング領域に高い密度の転位が集中的に生ずるようになる。しかし、発生する領域の大きさは、(a)の場合と比較して半分以下となる。さらに、シリコン基板中央部で生じていた転位の発生が減少する。

このようにドーピング領域の格子摩擦応力が減少

した場合には Si 基板内で転位が発生する領域の体積は減少するが、Si 基板上部の素子機能形成領域で平均転位密度の値は高くなり正常なデバイス動作への弊害が増加すると考えられる。

図5(e), (f), (g)は、不純物をドーピングすることによって格子摩擦応力が高くなった状態を想定した場合の結果である。(e)  $\rightarrow$  (f)  $\rightarrow$  (g)と格子摩擦応力が高くなると、ドーピングされた領域内で、転位の蓄積が抑制され、Si 基板上部での平均転位密度は低くなる。一方、ドーピングされていない領域における転位の発生領域やその密度はほとんど変わらない。

モデル要素に生じた転位の線長より転位密度  $\times$  要素体積を求め、これを全要素について足し合わせると、総転位線長  $l d^{(n)}$  を求める事ができる。すなわち、

$$l d^{(n)} = \sum_i \|\rho_G^{(n)}\| \times v_i \quad (7)$$

ここで、 $\rho_G$  は GN 転位密度、 $n$  はすべり系番号、 $v_i$  は、 $i$  番要素体積である。総転位線長が降温により増加する挙動について検討する。

図5(a)に示した破線より Si 基板を上下に分割したときの総転位線長とドーピング領域の格子摩擦応力と温度との関係を図6(a), (b)に示す。図6(a)に示すように、Si 基板上部 (U) では、ドーピング領域の格子摩擦応力が Si の値より小さく ( $30 \text{ MPa}$  以下) になると、初期温度から

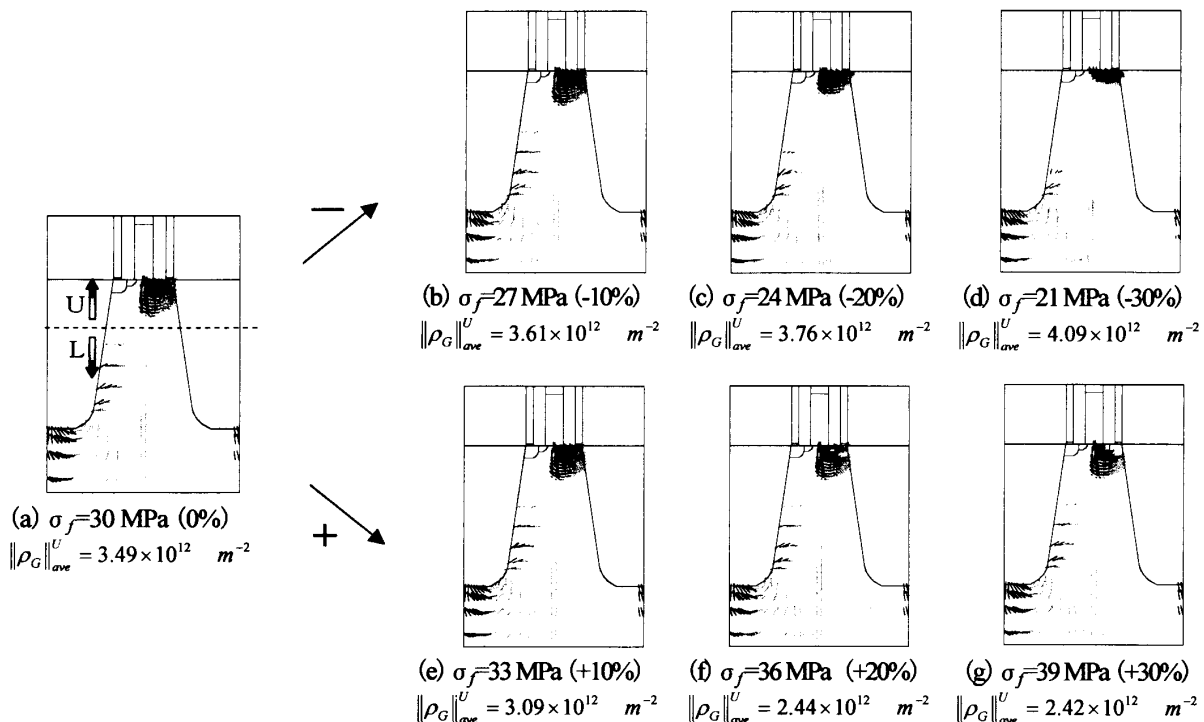
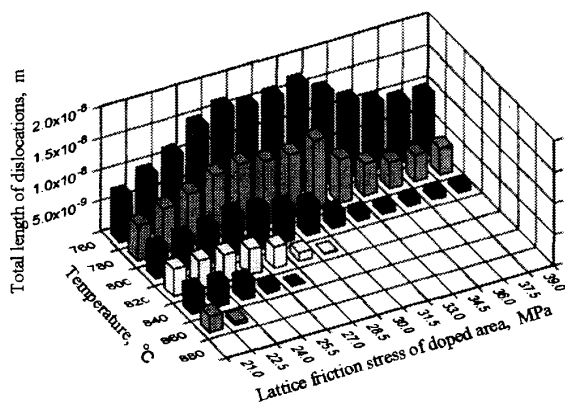
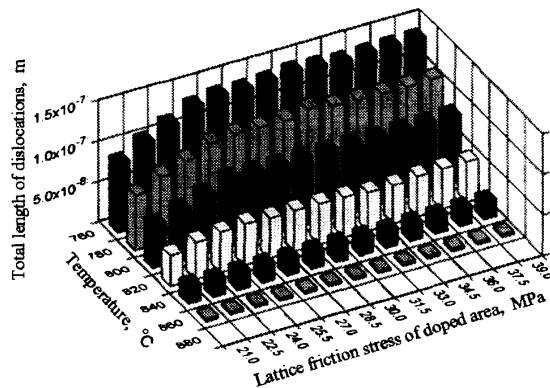


Fig. 5 GN dislocations which accumulate on the No.07 slip system when the temperature is  $760^\circ\text{C}$ .



(a) Upper area of Si substrate



(b) Lower area of Si substrate

Fig. 6 Total length of dislocations on the No.07 slip system as a function of temperature and lattice friction in doped area.

の温度差が少ない状態で塑性変形が生じるようになる。例えば格子摩擦応力が 22.5 MPa の場合、転位の蓄積は約 860°C から生じる。温度降下と共に総転位線長は徐々に増加する。しかし、760°C における総転位線長の値は、ドーピングの影響が無い場合 ( $\sigma_f = 30$  MPa) より減少している。このことは、図 5(d) に示したように、高密度の転位がこの領域に集中して生ずることで、転位の発生した領域の体積が小さくなっているためであり、総転位線長の減少がデバイス動作に有利になるとはいえない。一方、ドーピング領域の格子摩擦応力が Si の値より大きい (30 MPa 以上) 場合では、転位蓄積の開始が遅くなると同時に、図 5(g) に示したようにドーピングした領域に転位が生じなくなることから総転位線長の値が減少する。

図 6(b) に示した Si 基板下部 (L) では、格子摩擦応力が変化しても転位の蓄積が開始する温度に影響せず、全て 860°C より転位は生じ、温度降下と共に総転位線長の値は増加する。 $\sigma_f = 24.0$  MPa (-20%) 以下では転位の増加のしかたは緩やかになり、総転位線長の値も減少する。これは図 5(d) に示したように、Si 基板中央部での転位の発生が減少したことに起因する。一方、 $\sigma_f = 24.0$  MPa 以上では各温度で総転位線長の値は等しく、不純物ドーピングの影響をほとんど受けないことがわかる。

## 5. 結 言

温度降下により STI 型 ULSI セル内に生ずる転位と不純物ドーピングの効果について結晶塑性解析の手法を用いて解析を行い、発生する転位の構造と蓄積される転位の量について検討した。結果を以下に示す。

- (1) 温度降下に伴い 2 つの異なる空間構造を持つ転位が 12 すべり系のうち、それぞれ 4 つのすべり系で生じた。

- (2) 転位は、素子機能形成領域の上部とトレンチ底の各左右 4 ヶ所から生じ内部へ広がる構造である。
- (3) 不純物ドーピングにより格子摩擦応力が小さくなる場合、転位の発生する領域の体積と転位の総延長は減少するがドーピング領域に高密度の転位が集中して生じる。
- (4) ドーピング領域の格子摩擦応力が大きくなる場合、ドーピング領域の転位発生は減少し、ドーピングしていない領域の転位発生にはほとんど影響を与えない。

## 文 献

- (1) Ohashi, T., Sato, M., Maruizumi, T. and Kitagawa, I., Simulation of Dislocation Accumulation in ULSI Cells with STI Structure, *Applied Surface Science*, Vol. 216, (2003), pp. 340-346.
- (2) Sato, M., Ohashi, T., Maruizumi, T. and Kitagawa, I., Crystal Plasticity Analysis of Thermal Deformation and Dislocation Accumulation in ULSI Cells, *Key Engineering Materials*, Vol. 324-325, (2006), pp. 1035-1038.
- (3) Sato, M., Ohashi, T., Maruizumi, T. and Kitagawa, I., Crystal Plasticity Analysis of Dislocation Accumulation in ULSI Cells with Consideration of Temperature Dependence of the Lattice Friction Stress for Silicon, *Key Engineering Materials*, Vol. 340-341, (2007), pp. 199-204.
- (4) Yonenaga, I., Taishi, T., Huang, X. and Hoshikawa, K., Dynamic Characteristics of Dislocations in Ge-doped and (Ge+B) Codoped Silicon, *Journal of Applied Physics*, Vol. 93, No.1(2003), pp. 265-269.
- (5) Ashby, M. F., The Deformation of Plastically Non-homogeneous Materials, *Philosophical Magazine*, Vol. 21, (1970), pp. 399-424.
- (6) Ohashi, T., Crystal Plasticity Analysis of Dislocation Emission from Micro Voids, *International Journal of Plasticity*, Vol. 21, (2005), pp. 2071-2088.
- (7) Ohashi, T., Finite-element Analysis of Plastic Slip and Evolution of Geometrical Necessary Dislocations in Fcc Crystals, *Philosophical Magazine Letters*, Vol. 75, (1997), pp. 51-57.
- (8) Semiconductors Handbook Compilation Committee ed., *Semiconductors Handbook, revised edition* (in Japanese), (1977), P.135, Ohm-sha Publishing.
- (9) Tamamushi, B., *Encyclopedia for Physics and Chemistry 3rd edition* (in Japanese), (1981), P. 1068, Iwanami Publishing.