

Si 表面酸化の酸化反応メカニズム： 少数キャリア捕獲過程の p/n 比較

SATテクノロジー・ショーケース2026

■ はじめに

Siドライ酸化プロセスは、FinFETやGAAデバイスなどの高度なCMOSのゲートスタックSiO₂中間層(~1nm)を製造するために、依然として実用的な重要性を保っている。

これまでSiドライ酸化でよく知られるDeal-Grove モデルは30nm以下のSiO₂膜厚(X₀)に適用できないことから、Siドライ酸化プロセスを1~2nmまで説明できる新たな酸化反応経路モデルの確立が必要とされている。

■ 活動内容

このため、新たな酸化反応モデルとして『Loops A/B & Loop L-P growthモデル』を提案している。^{[1][2][3]}このモデルでは、Si清浄表面に存在するダイマードングリングボンドでの酸化(表面酸化)と表面酸化によって生成されたSi空孔での酸化(界面酸化)が、同時かつ協奏的に進行する。

表面酸化とは、Siダイマードングリングボンドに酸素が物理吸着後、化学吸着しSiO₂膜へと酸化することを指す。この際、Si基板では、酸化誘起歪みにより格子間のSi原子が放出されSi原子が抜けた場所には空孔が生成される。空孔はSi基板の多数キャリア捕獲により化学的に活性化し、酸素の吸着が可能となる。

界面酸化とは活性化した空孔に酸素が物理吸着後、化学吸着し電気的中性保持のための少数キャリア捕獲を経て、SiO₂膜へと酸化することを指す。界面酸化には、酸素吸着が1回生じる比較的高速な反応(一段階酸化: Loop A)と酸素吸着が2回生じる低速な反応(二段階酸化: Loop B)、そしてLoop Bから派生する少数キャリア捕獲なしに酸化反応が進行するLinear Parabolic growth反応が存在する。これらの反応により酸化が進行し、酸化膜厚X₀は式(1)となる。

$$X_0 = A_A(1 - e^{-k_A t}) + A_B(1 - e^{-k_B t}) + \frac{1}{2} \left[-A + \sqrt{A^2 + 4B(t + \tau)} \right] \quad (1)$$

特にLoop AとLoop Bは少数キャリア捕獲によって区別でき、少数キャリアを捕獲するとLoop A、しなければLoop Bが進行する。少数キャリア捕獲の際、空孔に化学吸着した酸素(O₂⁻(Chem))の影響により、少数キャリアが正孔であるn型Siの方が電子のp型Siよりも少数キャリアを捕獲しやすくLoop Aがより進行すると考えられる。

■ 本研究内容

本研究では、Loops A/Bモデルの伝導型依存を明らかにするため、p-Si(001)とn-Si(001)表面での酸化反応過程

をリアルタイムで放射光光電子分光(SR-XPS)測定し、X₀の時間発展をLoops A/B & L-Pモデルで解析した。フィッティングパラメータから求めたLoop Aへの分岐確率γ_Aの温度依存から少数キャリア捕獲と熱正孔捕獲過程をp/n表面で比較した。

膜厚X₀の時間変化に対してLoops A/BモデルによるX₀シミュレーションを行った結果を図1に示す。すべての結果に対して膜厚の時間変化をLoop A、Loop B、Loop L-Pの三つで記述できている。また、室温におけるp型とn型ではLoop Aの進行がn型で有利であることが明らかとなった。また、200°C以上ではp/nでの差異が小さくなり、温度の上昇によりγ_Aが増加すると明らかとなった。

この結果により、界面酸化の分岐は少数キャリア捕獲と熱正孔捕獲過程の二つに支配されていることが明らかとなった。また、室温での界面酸化反応は熱正孔捕獲よりも少数キャリア捕獲が支配的であった。これにより室温でのp/nでの膜厚成長速度の差が少数キャリアと化学吸着状態酸素とのクーロン力によって生じていると示唆された。

■ 関連情報等(特許関係、施設)

利用実験設備: SPring-8 BL23SU XPS、産業技術総合研究所 つくば中央事業所 ナノカーボン材料研究部門 ラマン分光装置 [1] S. Ogawa *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **59**, SM0801 (2020). [2] Y. Tsuda *et al.*, J. Chem. Phys. **157**, 234705 (2022). [3] Y. Tsuda *et al.*, e-J. Surf. Sci. Nanotech. **21**, 30 (2023).

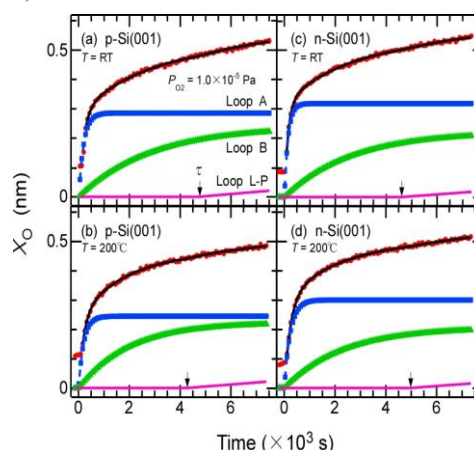


図1 膜厚 X₀の時間変化: Loops A/B 解析。(a) (b) p-Si(001) 室温および 200°C、(c) (d) n-Si(001) 室温および 200°C

代表発表者 岡部 優希(おかべ ゆうき)
所 属 日本大学大学院 生産工学研究科
電気電子工学専攻
問合せ先 〒275-8575 千葉県習志野市泉町 1-2-1
TEL: 047-474-2383 FAX: 047-474-2399
ciyu25010@g.nihon-u.ac.jp

■キーワード: (1) 表面酸化
(2) 界面酸化
(3) リアルタイム XPS

■共同研究者: 津田 泰孝¹, Hengyu Wen²,
吉越 章隆¹, 高桑 雄二³, 小川 修一², 山田 貴
壽⁴
日本原子力研究開発機構¹, 日本大学², 東北大学³, 産業技術総合研究所⁴