

プロセスシミュレータ

大倉 康幸* 岡本 稔* 清水 守** 島田 昭男* 袁 熙* 小池 秀耀***

Process simulator

Yasuyuki Ohkura*, Minoru Okamoto*, Mamoru Shimizu**, Akio Shimada*, Xi Yuan*, and Hideaki Koike***

Advance/TCAD プロセスシミュレータには、不純物拡散、イオン注入、堆積／エッチング、酸化の機能がある。この報告では、各プロセスの物理モデルおよびアルゴリズムについて解説する。本シミュレータは、新たに考案した幾何学的な計算モデルを考案したこと、シリコンカーバイド(SiC)対応を含めた3次元イオン注入を実装したことに特徴がある。

Key word: 半導体、プロセスシミュレータ、3次元計算、不純物拡散、非平衡反応拡散モデル、イオン注入、モンテカルロ法、4H-SiC 基板、堆積／エッチング、距離関数法モデル、酸化

1. はじめに

プロセスシミュレータはスタンフォード大学の SUPREM4 や既存の商用製品と基本的には同様である。Advance/TCAD のプロセスシミュレータで取り扱える工程は・イオン注入工程、・拡散工程、・酸化工程、・エッチング工程、・堆積工程である。Advance/TCAD のプロセスシミュレータの特徴は次の点にある。

① 3次元プロセスシミュレータである。既存の商用製品の主力は2次元プロセスシミュレータである。3次元シミュレータを実現するためには、2次元に比べて圧倒的に難しい3次元形状処理を実現する必要がある。新しい形状処理のアルゴリズムを開発し、堆積、エッチングの3次元処理が可能となった。

② MPI を用いた分散並列計算が可能である。3次元シミュレーションでは数百万から数千万の

格子の大規模解析と高速計算を実現する必要がある。3次元解析では2次元解析に比べて100倍近く計算時間がかかる。Advance/TCAD では MPI を用いて数百 MPU 以上による分散並列計算が可能となり、数千万から1億格子の計算が可能である。また、並列計算により高速で大規模な3次元シミュレーションが可能である。

③ イオン注入シミュレーションは高速なモンテカルロ計算を中心として最高レベルの機能を有している。

2. 不純物拡散モデル

半導体デバイスの製造工程をシミュレーションするためには、イオン注入後の結晶回復過程（アニール）を高精度に計算できなくてはならない。アニールは高温で処理されるため、注入不純物は拡散し再分布する。このため、アニールのシミュレーションは、拡散シミュレーションと古来から呼ばれている。

従来から主材料として用いられてきた、シリコン結晶においては、不純物（ホウ素、リン、ヒ素）について、拡散過程が詳細に調べられてきた。不純物の拡散が結晶欠陥と不純物の相互作用により発生する点欠陥拡散モデル（図1）は、注入後の過渡増速拡散（TED）、不純物の不活性化反応などを高精度に計算できるモデルとして、1、2次元

*アドバンスソフト株式会社 第1事業部

1st Computational Science and Engineering Group, AdvanceSoft Corporation

**アドバンスソフト株式会社 第2事業部

2nd Computational Science and Engineering Group, AdvanceSoft Corporation***アドバンスソフト株式会社 代表取締役会長
Representative director and chairman, AdvanceSoft Corporation

解析では広く利用されている。一方、3次元解析では、計算時間が膨大であり、あまり実用化されていなかった。また、点欠陥拡散モデルは多様な研究者による多様なモデルが乱立しており、個々のユーザーがそれぞれ選択し、シミュレーションパラメータのキャリブレーションを行って利用しているのが、現実である。

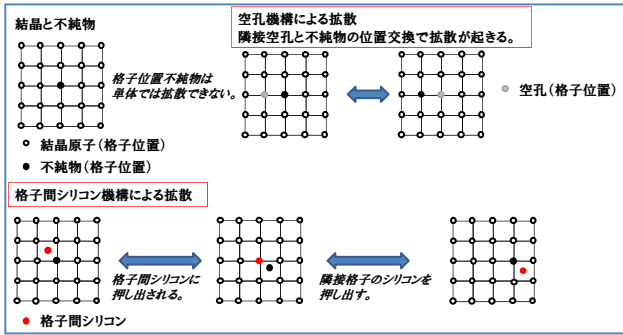


図 1 不純物の拡散が結晶欠陥と不純物の相互作用により発生する点欠陥拡散モデル

2.1. 計算モデル

2.1.1. モデルの概要

拡散モデルは点欠陥・不純物反応、点欠陥クラスタ反応、不純物不活性化反応が考慮されている非平衡反応拡散モデルと、格子位置不純物と点欠陥（格子間シリコン、空孔）の相互作用は考えず、拡散種の拡散係数を不純物によるキャリア濃度に依存する関数で表現して不純物拡散現象を解く Fermi モデルと呼ばれるモデルを実装している。

2.1.2. 非平衡反応拡散モデル

非平衡反応拡散モデルでは定義された拡散種と定義された反応式に基づく反応拡散方程式およびポアソン方程式を同時に解かなければならない。そこで、拡散種の総数 m に対してポアソン方程式を含む $m+1$ 個の連立方程式の解法について説明する。拡散種 $P_1, P_2, \dots, P_m$ の拡散方程式およびポアソン方程式は以下のように記述される。

$$\begin{aligned} \frac{dC_{P_1}}{dt} &= \nabla D_{P_1} \nabla C_{P_1} - GR_{P_1} \\ \frac{dC_{P_2}}{dt} &= \nabla D_{P_2} \nabla C_{P_2} - GR_{P_2} \\ &\vdots \\ \frac{dC_{P_m}}{dt} &= \nabla D_{P_m} \nabla C_{P_m} - GR_{P_m} \\ \nabla \varepsilon \nabla \varphi &= -q(p - n + Q_{P_1} + Q_{P_2} + \dots + Q_{P_m}) \end{aligned} \quad (1)$$

ここで、 C_{P_l} は l 番目の拡散種の濃度、 D_{P_l} は l 番目の拡散種の濃度、 GR_{P_l} は l 番目の拡散方程式の生成再結合項(GR)項、 ε は誘電率、 φ は静電ポテンシャル、 p は正孔密度、 n は電子密度、 Q_{P_l} は l 番目の拡散種の電荷となる。拡散中に電流が流れないと仮定すると、 p, n は次のように表現できる。

$$\begin{aligned} p &= n_i \exp\left(-\frac{\varphi}{k_B T}\right) \\ n &= n_i \exp\left(\frac{\varphi}{k_B T}\right) \end{aligned} \quad (2)$$

ここで、 $n_i (=np)$ は真性キャリア密度、 k_B はボルツマン定数、 T は絶対温度となる。本拡散シミュレータではデータ構造の単純化のため電荷 k の個数を全拡散種で共通に設定する。例えば電荷を 5 個に設定すると電荷は $k = +2, +1, 0, -1, -2$ で基準電荷 d は $d = 0$ となる。 l 番目の拡散種の電荷反応は平衡を仮定しているので、

$$P_l^d + k \cdot h^+ \xrightleftharpoons{eq.} P_l^{d+k} \quad (3)$$

と表される。 h^+ は正孔。 l 番目の拡散種の基準電荷状態 d に対する電荷状態の濃度は、

$$C_{P_l^{k+d}} = \gamma_{P_l^k} \left(\frac{p}{n_i}\right)^k C_{P_l^d} \quad (4)$$

と表される。ここで、

$$\gamma_{P_l^k} = \gamma_0 \exp\left(\frac{\gamma_T T}{T + T_0}\right) \exp\left(-\frac{\gamma_E}{k_B T}\right) \quad (5)$$

である。 $\gamma_0, \gamma_T, \gamma_E$ は各拡散種に依存するパラメータである。温度パラメータ T_0 は現状 636K に固定されている。中性状態が存在するならば、基準電荷状態 d は $d = 0$ とする。全電荷に関する総和は、次式で表される。

$$C_{P_l} = \sum_k C_{P_l^{d+k}} = \sum_k \gamma_{P_l^k} \left(\frac{p}{n_i} \right)^k C_{P_l^0} \quad (6)$$

l 番目の拡散種の拡散係数が電荷 k に依存すると仮定し、 l 番目の拡散方程式の右辺第 1 項に上式を代入すると、

$$D_{P_l} \nabla C_{P_l} = \sum_k D_{P_l^k} \gamma_{P_l^k} \nabla \left(\frac{p}{n_i} \right)^k C_{P_l^0} = \sum_k \left\{ D_{P_l^k} \gamma_{P_l^k} \nabla \left(\frac{p}{n_i} \right)^k \frac{C_{P_l}}{\sum_{k'} \gamma_{P_l^{k'}} \left(\frac{p}{n_i} \right)^{k'}} \right\} \quad (7)$$

を得る。ここで、必要な項は D_{P_l} なので、上式を拡散係数と濃度勾配の積となるように以下のよう近似する。

$$D_{P_l} \nabla C_{P_l} \cong \frac{\sum_k D_{P_l^k} \gamma_{P_l^k} \left(\frac{p}{n_i} \right)^k}{\sum_k \gamma_{P_l^k} \left(\frac{p}{n_i} \right)^k} \nabla C_A \quad (8)$$

従って、 l 番目の拡散種の拡散係数は次式で表される。

$$D_{P_l} = \frac{\sum_k D_{P_l^k} \gamma_{P_l^k} \left(\frac{p}{n_i} \right)^k}{\sum_k \gamma_{P_l^k} \left(\frac{p}{n_i} \right)^k} \quad (9)$$

ここで、 l 番目の拡散種の電荷毎に定義された拡散係数を以下のように定義する。

$$D_{P_l^k} = D_0 \exp \left(-\frac{D_E}{k_B T} \right) \quad (10)$$

ここで、 D_0, D_E は l 番目、電荷 k を持つ拡散種の頻度因子および活性化エネルギーとなる。これらはパラメーターとして与えられる。 C_{Pl} と同様、 l 番目の拡散種の電荷 (Q_{Pl}) は平均電荷を用いて次のように記述される。

$$Q_{P_l} = \sum_k k C_{P_l^{k+d}} = \sum_k k \gamma_{P_l^k} \left(\frac{p}{n_i} \right)^k C_{P_l^0} = \frac{\sum_k k \gamma_{P_l^k} \left(\frac{p}{n_i} \right)^k}{\sum_k \gamma_{P_l^k} \left(\frac{p}{n_i} \right)^k} C_{P_l} \quad (11)$$

となる。

次に、境界条件について説明する。本モデルでは 3 つのタイプ (Type1, Type2, Type3) の境界条件を想定している。Type1 はノイマン境界条件で、この場合の境界は拡散種の界面での移動はない。式で表現すると、

$$J_1 = 0 \quad (12)$$

となる。Type2 は表面生成再結合境界条件で、拡散種 A の平衡濃度 C_A^* が定義されていなければならない。式で表現すると、

$$J_2 = K_{surf} (C_A - C_A^*) \quad (13)$$

となる。 K_{surf} は次のように定義される。

$$K_{surf} \equiv \kappa_{surf} \exp \left(-\frac{E_{surf}}{k_B T} \right) \quad (14)$$

ここで、 κ_{surf}, E_{surf} は K_{surf} の頻度因子および活性化エネルギーとなる。これらはパラメーターとして与えられる。速度 K_{surf} で再結合の速さが決まり、通常 $K_{surf} > 0$ とするので、 $C_A > C_A^*$ ならば界面で拡散種 A が生成される。逆に $C_A < C_A^*$ ならば拡散種 A は消滅する。Type3 は偏析条件で、界面に接する 2 つの材料の物理量は異なっている。式で表現すると、

$$J_3 = K_{se} (C_{A1} - m_s C_{A2}) \quad (15)$$

となる。析出速度 K_{se} および偏析係数 m_s は次のように定義される。

$$K_{se} \equiv \kappa_{se} \exp \left(-\frac{E_{se}}{k_B T} \right) \quad (16)$$

$$m_s \equiv \mu_s \exp \left(-\frac{E_s}{k_B T} \right)$$

ここで、 κ_{se}, E_{se} は K_{se} の頻度因子および活性化エネルギーとなる。 μ_s, E_s は m_s の頻度因子および活性

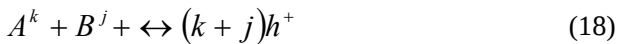
化エネルギーとなる。これらはパラメーターとして与えられる。 C_{A1} および C_{A2} は偏析が起こる 2 つの領域(1,2)での拡散種 A の濃度に相当する。 $C_{A1} > m_5 C_{A2}$ の場合は領域 1 から 2 へ拡散種 A の偏析が起こる。逆に、 $C_{A1} < m_5 C_{A2}$ の場合は領域 2 から 1 へ拡散種 A の偏析が起こる。

最後に、実装されている 3 種類の反応式(Type1、Type2、Type3) について説明し、それぞれの反応での GR 項を導入する。なお、電荷反応については平衡状態を仮定しており個々の電荷種の方程式は解かない。

Type1



Type1 は拡散種 A・B がそれぞれ平衡濃度を与えられており、対消滅反応に相当する。この場合、どちらか一方の拡散種の拡散係数は非零でなければならない。電荷つき反応式は、



となる。 k, j は電荷状態で、 h^+ は正孔となる。電荷 k, j の場合の C_A, C_B は、

$$C_{A^k} = \gamma_{A^k} \left(\frac{p}{n_i} \right)^k C_{A^0} \quad (19)$$

$$C_{B^j} = \gamma_{B^j} \left(\frac{p}{n_i} \right)^j C_{B^0}$$

となる。拡散種 A と B の結合によって両者は消滅し、最終的に拡散種 A と B の濃度は平衡濃度 C_A^*, C_B^* に飽和するので GR 項は

$$GR_A = GR_B = K(C_A C_B - C_A^* C_B^*) \quad (20)$$

と表現できる。ここで、 K は反応速度定数とする。上式の C_A, C_B に式(19)を代入すると、近似的に K は次のように表現される。

$$K \cong 4\pi R_{cap}$$

$$\frac{\sum_{k,j} (D_{A^k} + D_{B^j}) \gamma_{A^k} \gamma_{B^j} \left(\frac{p}{n_i} \right)^{k+j} \exp\left(-\frac{E_{ba}^{k,j}}{k_B T}\right)}{\sum_k \gamma_{A^k} \left(\frac{p}{n_i} \right)^k \sum_j \gamma_{B^j} \left(\frac{p}{n_i} \right)^j} \quad (21)$$

ここで、 $E_{ba}^{k,j}$ は拡散種 A (電荷 k) と B (電荷 j) の反応におけるポテンシャル障壁の大きさであり、 R_{cap} は反応捕獲半径である。 C_A^*, C_B^* は

$$C_A^* = \alpha_A^* \exp\left(-\frac{E_A^*}{k_B T}\right) \quad (22)$$

$$C_B^* = \alpha_B^* \exp\left(-\frac{E_B^*}{k_B T}\right)$$

と定義する。 α_A^*, α_B^* は C_A^*, C_B^* の頻度因子、 E_A^*, E_B^* は C_A^*, C_B^* の活性化エネルギーであり、パラメーターとしてユーザーが与えなければならない。Type1 の実際の例としては格子間シリコン (I) と空孔 (V) との反応がこれに相当する。

Type2



Type2 は拡散種 A・B が結合し X に変化する反応に相当する。この反応を満たすためには A・B の拡散係数は非零にしなければならない。この反応は化学で一般に用いられる生成・分解反応に相当するため、GR 項は次のように表現される。

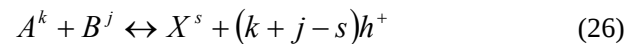
$$GR_X = -GR_A = -GR_B$$

$$= -K_{f_{AB}} C_A C_B + K_{r_{AB}} C_X$$

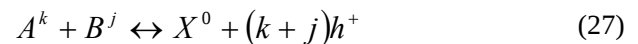
$$= K_{f_{AB}} \left(-C_A C_B + \frac{1}{K_{eq_0}} C_X \right) \quad (24)$$

$$K_{eq_0} = \frac{K_{f_{AB}}}{K_{r_{AB}}} \quad (25)$$

この場合の電荷つき反応方程式は、



のように表現される。最安定状態 X^0 を中間に考えると、



この電荷反応は十分高速であることを仮定 (局所平衡仮定) すると、

$$K_{r_{AB}^s} = K_{r_{AB}^0} \gamma_{X^s} \left(\frac{p}{n_i} \right)^s \quad (28)$$

が得られる。電荷 k, j, s の場合の C_A, C_B, C_X は、

$$C_{A^k} = \gamma_{A^k} \left(\frac{p}{n_i} \right)^k C_{A^0}$$

$$C_{B^j} = \gamma_{B^j} \left(\frac{p}{n_i} \right)^j C_{B^0} \quad (29)$$

$$C_{X^s} = \gamma_{X^s} \left(\frac{p}{n_i} \right)^s C_{X^0}$$

となる。式(29)を式(24)に代入すると、生成反応速度定数 K_{fAB} は近似的に次のように得られる。

$$K_{fAB} \cong \frac{\sum_{k,j} K_{f_{AB}^{k,j}} \gamma_{A^k} \gamma_{B^j} \left(\frac{p}{n_i} \right)^{k+j}}{\sum_k \gamma_{A^k} \left(\frac{p}{n_i} \right)^k \sum_j \gamma_{B^j} \left(\frac{p}{n_i} \right)^j} = 4\pi R_{cap} \quad (30)$$

$$\frac{\sum_{k,j} (D_{A^k} + D_{B^j}) \gamma_{A^k} \gamma_{B^j} \left(\frac{p}{n_i} \right)^{k+j} \exp\left(-\frac{E_{ba}^{k,j}}{kT}\right)}{\sum_k \gamma_{A^k} \left(\frac{p}{n_i} \right)^k \sum_j \gamma_{B^j} \left(\frac{p}{n_i} \right)^j}$$

ここで、電荷 k,j の場合の生成反応速度定数 K_{fAB} は次のように定義される。

$$K_{f_{AB}^{k,j}} \equiv 4\pi R_{cap} (D_{A^k} + D_{B^j}) \exp\left(-\frac{E_{ba}^{k,j}}{kT}\right) \quad (31)$$

$R_{cap}, D_{A^k}, D_{B^j}, E_{ba}^{k,j}$ は反応捕獲半径、電荷 k を持つ拡散種 A の拡散係数、電荷 j を持つ拡散種 B の拡散係数、電荷 k を持つ拡散種 A と電荷 j を持つ拡散種 B が反応するときの反応障壁エネルギーであり、パラメーターとしてユーザーが与えなければならない。

同様に分解反応速度定数 K_{rAB} も近似的に次のように表される。

$$K_{rAB} \cong \frac{K_{fAB}}{K_{eq0} \sum_j \gamma_{X^j} \left(\frac{p}{n_i} \right)^j} \quad (32)$$

K_{eq0} は基準電荷反応の平衡定数で次のように定義される。

$$K_{eq0} \equiv \kappa_{eq0} \exp\left(-\frac{E_{bi}^0}{kT}\right) \quad (33)$$

ここで、 κ_{eq0}, E_{bi}^0 は基準電荷反応の平衡定数の頻度因子、活性化エネルギーであり、パラメーターとしてユーザーが与えなければならない。Type2 の

実際の例として、 $A = I$ 、 $B = \text{ホウ素 (B)}$ が反応して BI クラスタが生成する場合はこの反応に相当する。

Type3



Type3 は拡散種 A の高次クラスタの生成・消滅反応に相当する。最初の式はクラスタ核の生成反応に相当する。2 番目の式は高次クラスタの成長分解反応に相当する。この反応モデルは拡散種の増加を抑えるための経験モデルであり、Type2 の積み重ねで記述することも可能である。拡散種 A の高次クラスタ A_n は非拡散種とみなす。さらに、クラスタ次数は考慮せずクラスタ化している A の濃度のみでモデル化する。この場合の GR 項は Type2 の反応を拡張した反応になるので次のように表現できる。

$$\begin{aligned} -GR_A &= GR_{A_{cluster}} \\ &= K_{G_1} C_A C_A + K_{G_2} C_A C_{A_{cluster}} - K_{br} C_{A_{cluster}} \\ &= -K_{G_1} C_A C_A - (K_{G_2} C_A - K_{br}) C_{A_{cluster}} \\ &= -K_{G_1} C_A C_A - K_{G_2} \left(C_A - \frac{K_{br}}{K_{G_2}} \right) C_{A_{cluster}} \end{aligned} \quad (36)$$

電荷 k,j の場合の $C_A, C_{A_{cluster}}$ は、

$$C_{A^k} = \gamma_{A^k} \left(\frac{p}{n_i} \right)^k C_{A^0} \quad (37)$$

$$C_{A_{cluster}^j} = C_{A^k}$$

式(36)に式(37)を代入すると、初期クラスタ生成反応速度定数 K_{G1} は近似的に次のように得られる。

$$K_{G_1} \cong 4\pi R_{cap} \frac{\sum_{k,j} (D_{A^{d+k}} + D_{A^{d+j}}) \gamma_{A^{d+k}} \gamma_{A^{d+j}} \left(\frac{p}{n_i} \right)^{k+j} \exp\left(-\frac{E_{ba1}^{k,j}}{k_B T}\right)}{\left[\sum_k \gamma_{A^k} \left(\frac{p}{n_i} \right)^k \right]^2} \quad (38)$$

ここで、電荷 k,j の場合の生成反応速度定数 K_{G1} は次のように定義される。

$$K_{G_1} = 4\pi R_{cap} (D_{A^k} + D_{A^j}) \exp\left(-\frac{E_{ba1}^{k,j}}{k_B T}\right) \quad (39)$$

$R_{cap}, D_A^k, D_A^j, E_{ba1}^{kj}$ は反応捕獲半径、電荷 k を持つ拡散種 A の拡散係数、電荷 j を持つ拡散種 A の拡散係数、電荷 k を持つ拡散種 A と電荷 j を持つ拡散種 A が反応するときの反応障壁エネルギーであり、パラメータとしてユーザーが与えなければならない。

同様に、高次のクラスタ生成反応速度定数 K_{G2} は近似的に次のように得られる。

$$K_{G2} \cong 4\pi R_{cap} \frac{\sum_k (D_{A^k}) \gamma_{A^k} \left(\frac{p}{n_i}\right)^k \exp\left(-\frac{E_{ba2}^k}{k_B T}\right)}{\left[\sum_k \gamma_{A^k} \left(\frac{p}{n_i}\right)^k\right]^2} \quad (40)$$

ここで、電荷 k の場合の生成反応速度定数 K_{G1} は次のように定義される。

$$K_{G2}^k = 4\pi R_{cap} D_{A^k} \exp\left(-\frac{E_{ba2}^k}{k_B T}\right) \quad (41)$$

$R_{cap}, D_A^k, E_{ba1}^{kj}$ は反応捕獲半径、電荷 k を持つ拡散種 A の拡散係数、電荷 k を持つ拡散種 A と電荷 j を持つ A の高次クラスタが反応するときの反応障壁エネルギーであり、パラメータとしてユーザーが与えなければならない。

この反応が分解するときの分解反応速度定数 K_{br} は次のよう定義する。

$$K_{br} = \kappa_{br} \exp\left(-\frac{E_{br}}{kT}\right) \quad (42)$$

ここで、 κ_{br} は K_{br} の頻度因子で、 E_{br} は K_{br} の活性化エネルギーであり、パラメータとしてユーザーが与えなければならない。Type3 の実際の例として、I311 クラスタ形成がこの反応に相当する。

2.1.3. Fermi モデル

Fermi モデルにおける結晶中の不純物拡散は、格子位置不純物と点欠陥（格子間シリコン、空孔）の相互作用は考えておらず、拡散種の拡散係数を不純物によるキャリア濃度に依存する関数で表現して不純物拡散現象を解くものである。

このモデル使用する基本方程式は、

$$\frac{\partial C_A(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r} \left[D \frac{\partial C_A(x, t)}{\partial r} \right] \quad (43)$$

となる。ここで、 C_A は拡散種の濃度に相当する。

拡散係数は、

$$D = D_i^0 + D_i^+ \left(\frac{p}{n_i}\right) + D_i^- \left(\frac{n}{n_i}\right) + D_i^- \left(\frac{n}{n_i}\right)^2 \quad (44)$$

で表される。

3. イオン注入機能

3.1. 背景

半導体デバイスの製造工程をシミュレーションするためには、イオン注入後の不純物分布を高精度でシミュレーションすることが必要である。そのために多様なモデルが古くから研究されてきた。最初に実用的 TCAD で用いられるようになったのは、解析モデルと呼ばれるものである。これは、実験から抽出された 1 次元深さ方向分布を解析関数でフィッティングし、そのパラメータテーブルを提供するものであった。1 次元注入では、当然のことながら実験を良く再現する。また、2 次元分布についても経験的な合わせこみの結果、限定的な範囲において実用的な不純物分布が得られるようになってきた。しかし、3 次元の複雑な形状では、ほぼ適用不可能である。また、経験的パラメータの膨大な蓄積が必要であり、新材料への適用が非常に困難なことも欠点である。このような事情を考慮し、当シミュレータでは基本機能としてモンテカルロ法によるイオン注入シミュレータを実装した。

モンテカルロ法では、注入したイオンと材質を構成している原子の相互作用を逐次計算し、イオンの停止位置を算出することから、様々な材質に適用可能となっている。従来の微細素子基板材質として取り扱われた Si はもとより、Si 基板における物性による限界を乗り越える新たな材料として近年注目されている 4H-SiC, 6H-SiC 等の六方晶系結晶材質にも適用可能である。計算精度はイオンと原子の相互作用の取り扱い方に依存する。古来よりイオンと原子の相互作用は、核阻止能モデル、電子阻止能モデルとしてモデル化されてお

り、それぞれ長い研究の歴史を経て高精度化されてきた。

本章では、開発した 3 次元 TCAD システムの機能の 1 つであるモンテカルロ法によるイオン注入機能について説明していく。3.2 節では搭載している物理モデルについて述べ、3.3 節ではシミュレータの計算精度の検証として実験値との比較結果と実用的な 3 次元構造へのイオン注入計算例を示す。4 節でこの章のまとめを行う。

3.2. 理論枠組み

モンテカルロ法によるイオン注入計算では、最終的にイオンが停止するまでの軌跡を、材質を構成する原子との相互作用を逐次計算することで求めている。注入されたイオンが速度を落とすメカニズムは大きく 2 つに分けられる。1 つは、注入したイオンが材質を構成する原子を取り囲む電子と相互作用することで電子を励起したり、材質構成原子をイオン化することによってエネルギーを失う過程(電子阻止能)である。もう一方は、注入したイオンと材質構成原子との直接衝突によるエネルギー損失過程(核阻止能)である。

われわれは、核阻止能モデルとして、3 次元 2 体衝突近似を基に原子間相互作用として ZBL ポテンシャル[3]、電子阻止能モデルとして LSS[4]、Firsov[5]、VIENNA[6]モデルを採用した。これにより、幅広い材質に対応したイオン注入シミュレーションが可能である。また、高ドーズ量イオン注入において、結晶の破壊によるチャネリング現象の抑制の顕著化が知られている。この効果を取り入れるために、Kinchin-Peace モデル[7]と確率的結晶破損率を導入した。以下で、これらのモデルについて簡単に説明する。

3.2.1. 核阻止能モデル

核阻止能におけるイオンと原子の相互作用は 2 体衝突の積み重ねとして近似して扱われる。分子動力学のような多体効果をダイナミックに計算する手法に比べ、2 体衝突のみで近似可能であるということで計算を効率化している。その一方、2 体衝突近似は妥当性のある範囲での適用が条件

となる。例えば、原子間距離が小さく密な固体材料に、非常に軽いイオンを低エネルギーで注入した場合や、リコイルカスケードによる結晶破壊過程などは、2 体衝突近似の適用範囲を超える可能性があり注意が必要である。

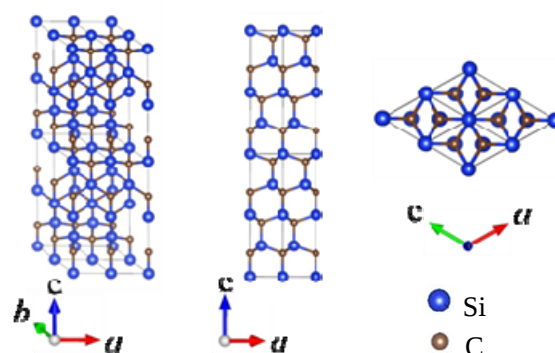
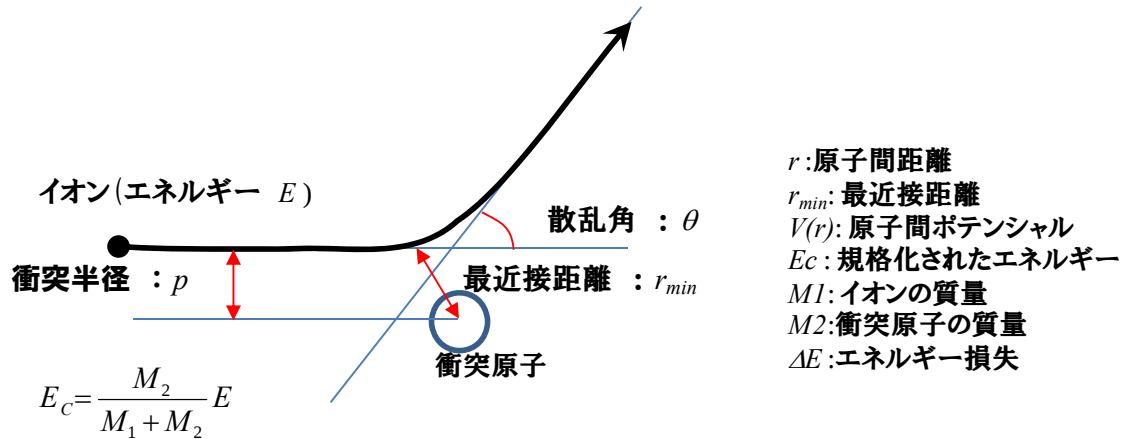


図 2 4H-SiC 結晶構造

2 体衝突による散乱およびそれに伴う核阻止能を計算するためには、衝突ターゲット原子の位置を正確に探索する必要がある。シミュレータ内では衝突ターゲット原子の探索において、結晶材質に対しては、入射したイオンの現在位置情報を基に、必要な周期分の結晶を発生させる。図 2 にシミュレータ内で発生されている 4H-SiC の結晶構造を示した。左側から、全体の鳥瞰図、(01-10)面、(0001)面の平面図である。大きい丸が Si、小さい丸が C を表している。六方晶系に属する 4H-SiC を扱えていることが確認できる。この中から、注入したイオンの現進行方向上における最近接距離の最も短い原子を衝突ターゲット原子として選択する。また、アモルファス材質に対しては、次の衝突までに直進する距離を、その距離が固体材料の膜厚に比べ十分小さいと仮定し、材料の原子数密度から求まる平均自由行程距離としている。衝突半径については、原子位置がランダムに配置されていると考え、原子数密度と乱数を用いて求めている。衝突ターゲット原子が決定された後に、結晶材質の場合と同様に、その原子との散乱による核阻止能を計算する。



最近接距離の方程式

$$1 - \frac{p^2}{r_{min}^2} - \frac{V(r_{min})}{E_c} = 0$$

重心座標系散乱角公式

$$\Theta = \pi - 2p \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{1}{r^2 g(r)} dr \quad g(r) = \sqrt{1 - \frac{p^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E_c}}$$

重心座標系散乱角から実験座標系散乱角への変換公式

$$\theta = \tan^{-1} \left(\sin \Theta / \left(\frac{M_1}{M_2} + \cos \Theta \right) \right) \quad \tan \theta = \frac{\sin \Theta}{\left(\frac{M_1}{M_2} + \cos \Theta \right)}$$

エネルギー損失

$$\Delta E = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \sin^2 \left(\frac{\Theta}{2} \right) E$$

図 3 2体散乱(実験系)

3.2.2. 電子阻止能モデル

● Firsov モデル

低速の入射イオンが衝突標的原子と衝突した際に、電子の運動量を交換することによって入射イオンは減速する。Firsov モデルではこの現象に基づき提案されたものである。そのため、エネルギー損失は、衝突原子との散乱と同時に発生する。エネルギー E 、質量数 M_1 、原子番号 Z_1 のイオンが原子濃度数 N_t 、原子番号 Z_2 の原子で構成されている材質構成原子との衝突の際の電子によるエネルギー損失は式(45)のように表される。

$$\Delta E = C_{Fir} \frac{0.05973(Z_1 + Z_2)^{7/3}}{(1 + 0.31(Z_1 + Z_2)^{1/3} r_{min})^5} \sqrt{\frac{E}{M_1}} \quad (45)$$

質量数 M の原子の運動エネルギーを古典的な描

像と同様に取られると、 $v = \sqrt{2E/M}$ と表される。従来から電子阻止能は注入イオンの運動速度に比例することが知られており、式(45)はその性質を再現している。また、衝突時の最近接距離 r_{min} が陽に含まれていることが特徴である。 C_{Fir} はパラメーターである。

● LSS モデル

このモデルは、Firsov モデル同様、低速の注入イオンを対象に提案された。異なる点は、エネルギー損失を統計的な原子モデルである Thomas-Fermi モデルに基づき算出されていることにある。Thomas-Fermi モデルでは、原子を原子核の電荷のもとに束縛された電子雲とみなす。その電子雲中を入射イオンが通過する際にそれら電子と非弾性散乱を行う、という考えに基づいて

いる。そのため、エネルギー損失は材質構成原子との散乱前後の飛行中に発生する。エネルギー E , 質量数 M_1 , 原子番号 Z_1 のイオンが原子濃度数 N_t , 原子番号 Z_2 の原子で構成されている物質中を距離 Λ だけ飛行、進入した際のエネルギー損失は式(46)および(47)のように表される。

$$\Delta E = N_t \Lambda S_e \quad (46)$$

$$S_e = C_{LSS} \frac{1.212 Z_1^{7/6} Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}} \sqrt{\frac{E}{M_1}} \quad (47)$$

エネルギー損失は固体材料中におけるイオン・原子散乱間の移動距離に比例した形になっている。 C_{LSS} はパラメーターである。

● VIENNA モデル

このモデルは、チャネリング分布のシリコン結晶面方位依存性が良く合うように、調整された経験モデルである。このモデルの特徴として、Firsov モデルのような局所モデルの 1 つである Oen-Robinson モデルと非局所モデルである LSS モデルを混合していることがある。そのため、より多くのパラメーターが必要となるが、Si 基板の (110) 面へのイオン注入計算などで実験値との良い一致を示すことが知られている。エネルギー損失は式(48)～(50)として表される。

$$\Delta E = \Delta E_{loc} + \Delta E_{non-loc} \quad (48)$$

$$\Delta E_{loc} = x_{loc} \frac{S_e}{2\pi a_{OEN}^2} \exp\left(-\frac{p_{cut}}{a_{OEN}}\right) \quad (49)$$

$$\Delta E_{non-loc} = N_t \Lambda S_e \left[(1 - x_{loc}) + x_{loc} \left(1 + \frac{p_{cut}}{a_{OEN}}\right) \exp\left(-\frac{p_{cut}}{a_{OEN}}\right) \right] \quad (50)$$

式(49), (50)に含まれる a_{OEN} は Oen-Robinson 遮蔽長であり、式(51)として定義される。

$$a_{OEN} = \frac{fa}{0.3Z_1^b} \quad (51)$$

ここに含まれる f, b および、式(49), (50)に含まれる x_{loc}, p_{cut} はパラメーターである。また、式(49), (50)における S_e は式(46)の LSS モデルにおけるエネルギー損失と同じである。

3.2.3. 結晶熱振動モデル

結晶原子は熱振動により平衡位置から $0.1 \text{ \AA}$ 程度変位している。すなわち、結晶の原子列あるいは原子面は $0.1 \text{ \AA}$ 程度の太さあるいは厚さを持つことになる。結晶材質へのイオン注入におけるチャネリング現象を適切に再現するためには、この効果を適切に取り入れる必要がある。われわれは、熱振動の効果として熱振動変異をデバイ模型により取り扱い、それを結晶平均位置からの標準偏差として取り入れている。デバイ模型における熱振動振幅は式(52)として表される。

$$\langle r^2 \rangle_{RMS} = \sqrt{\frac{3\hbar^2}{Mk_B\theta} \left[\frac{1}{4} + \frac{T}{\theta} \phi\left(\frac{\theta}{T}\right) \right]} \quad (52)$$

ここで、 ϕ はデバイ関数であり、式(53)として定義される。

$$\phi(\xi) = \frac{1}{\xi} \int_0^\xi \frac{t}{\exp(t) - 1} dt \quad (53)$$

3.2.4. 結晶破壊モデル

高ドーズ注入では、注入初期ではチャネリングが見られるが、後期ではチャネリングの抑止現象が知られている。これは、注入中に結晶が破壊され、チャネリング抑止が働くことによる、と考えられている。結晶破壊は、衝突時の核阻止エネルギー損失によるものである。これらの現象を、カスケード破壊として経験的に調整したものが Kinchin-Peace モデルである。このモデルでは、1 回の 2 体散乱における注入イオンから材質構成原子への転位エネルギー ΔE を基に、生成される点欠陥量を見積もる。材質構成原子の原子番号を Z , 質量数を M とした際の、点欠陥生成エネルギーおよび点欠陥発生個数は式(54)のように表される。

$$G_{\text{defect}} = \begin{cases} 0 & \text{for } E_V < E_D \\ 1 & \text{for } E_D \leq E_V < 2.5E_D \\ \frac{0.8E_V}{2E_D} & \text{for } 2.5E_D \leq E_V \end{cases} \quad (54)$$

$$E_V = \Delta E / \left\{ 1 + Z^{\frac{2}{3}} M^{-\frac{1}{2}} \left(E_D + \alpha E_D^{\frac{3}{4}} + \beta E_D^{\frac{1}{6}} \right) \right\} \quad (55)$$

$$\alpha = 0.40244, \quad \beta = 3.4008$$

$$E_D = 0.01014Z^{-7/3} \Delta E \quad (56)$$

Kinchin-Peace モデルは、1 回の 2 体散乱の転移エネルギーが生成する点欠陥量を見積もるためのものであり、結晶破損量は各解析要素の確率的結晶欠陥率として保持され、チャネリング阻止力として計算に寄与する。確率的結晶欠陥率は式(57)とし表される。

$$R_{\text{defect}}^{\text{new}} = R_{\text{defect}}^{\text{old}} + C_{\text{AMR}} G_{\text{defect}} \frac{(1 - R_{\text{defect}}^{\text{old}})}{V * N} w \quad (57)$$

ここで、 $R_{\text{defect}}^{\text{old}}$ は更新前の結晶欠陥率、 $R_{\text{defect}}^{\text{new}}$ は更新後の結晶欠陥率、 C_{AMR} は調整パラメーター、 w はモンテカルロ粒子の重み、 V は各要素体積、 N は材質構成原子の数密度を表している。

3.3. 結果

2 節で記述した電子阻止能モデルに含まれるパラメーターは、さまざまな実験データに合うように調整されなければならない。そこで、われわれの調整したパラメーターの汎用性およびシミュレーションの妥当性の検証として、複数のイオン注入実験との比較を行った。3.3.1 項では Si 基板を、3.3.2 項では 4H-SiC 基板を対象にしたイオン注入実験との比較結果を示す。ここで、それらのシミュレーションにおいて、パラメーター値は全て同じであることに留意されたい。3.3.3 項では、Advance/TCAD の特徴の 1 つである 3 次元構造への適用事例を示します。n 型 MOSFET には 4H-SiC 基板、六角トレンチには Si 基板を適用した。

3.3.1. Si 基板

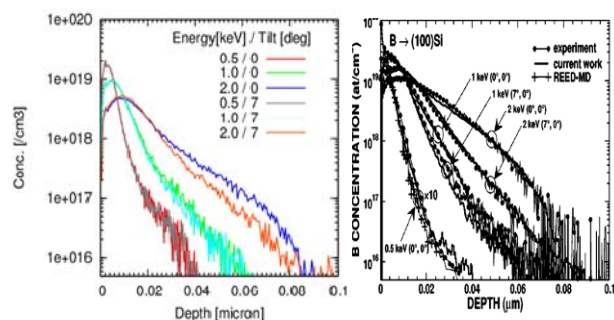


図 4 ティルト角 0° と 7° をつけた場合の B イオン注入のエネルギー依存性。エネルギー: 0.5, 1, 2

keV, ドーズ量: $3 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ 。イオン注入面: Si(100)。

図 4 にティルト角を $0^\circ, 7^\circ$ 、ドーズ量を $3 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ と設定した場合の B イオン注入におけるエネルギー依存性を示した。注入エネルギーはそれぞれ 0.5, 1, 2 keV となっている。左図に Advance/TCAD によるシミュレーション結果、渦に実験結果[8]を示している。ティルト角 0° における Si 結晶内のチャネリングの効果やティルト角を 7° とした場合の注入方向がチャネリング軸から外れたことによる基板深部への進入のし難さを再現できていることが判る。本シミュレータで採用している電子阻止能モデルでは数百 keV 以上の高エネルギーにおけるイオン注入の実験結果を再現することは難しいとされている。しかし、これらに対してはパラメーター調整を行うことで幅広い注入エネルギー範囲に対応可能とした。その一例を図 5 に示した。

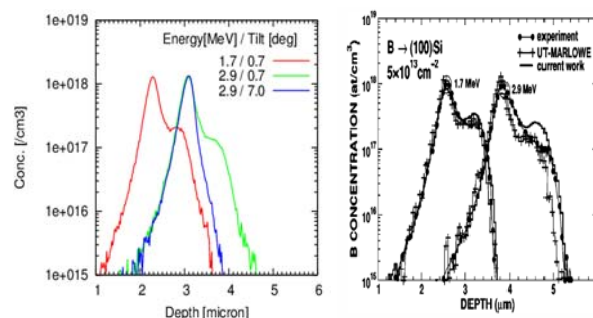


図 5 ティルト角 0° と 7° をつけた場合の B イオン注入のエネルギー依存性。エネルギー: 1.7, 2.9 MeV, ドーズ量: $5 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ 。イオン注入面: Si(100)。

図 5 にティルト角を $0^\circ, 7^\circ$ 、ドーズ量を $5 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ と設定した場合の B イオン注入におけるエネルギー依存性を示した。注入エネルギーはそれぞれ 1.7, 2.9 MeV となっている。左図に Advance/TCAD によるシミュレーション結果、右図に実験結果[9]を示している。MeV オーダーの高エネルギー注入条件に対しても、不純物分布のピーク位置、ピーク高さ、テイル部分の広がりについて概ね再現できていることが見て取れる。

また、注入イオン種は B イオンだけではなく、選択可能イオン種は、各種パラメーター調整済みのものとして B, As, P, Sb, Al, N, BF₂ となっている。さらに、パラメータファイルを調整することによって周期表に記述されている元素 H から Pb までを選択可能となっている。B イオン以外のパラメーター調整済みのシミュレーション結果例を以下に示す。

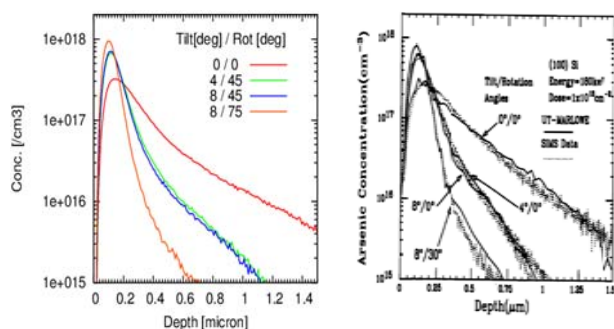


図 6 As イオン注入のティルト角依存性。ティルト角:0, 4, 8°、ドーズ量: $1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 、注入エネルギー:180keV。イオン注入面:Si(100)。

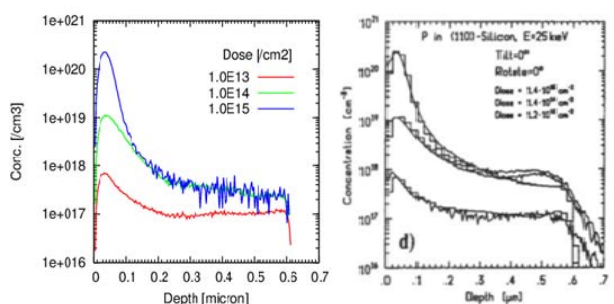


図 7 P イオン注入におけるドーズ依存性。エネルギー: 25 keV、ティルト角: 0°、ドーズ量: 1×10^{13} , 1×10^{14} , $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ 。イオン注入面:Si(110)。

図 6 にドーズ量を $1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 、注入エネルギーを 180keV と設定した場合の As イオン注入におけるティルト角依存性を示した。ティルト角はそれぞれ 0, 4, 8° となっている。左図に Advance/TCAD によるシミュレーション結果、右図に実験結果[10]を示している。不純物分布のピーク位置、ピーク高さ、テイル部分の広がりについて概ね再現できていることが見て取れる。

図 7 に注入エネルギーを 25keV、ティルト角を 0° と設定した場合の P イオン注入におけるドーズ

量依存性を示した。ドーズ量はそれぞれ 1×10^{13} , 1×10^{14} , $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ となっている。左図に Advance/TCAD によるシミュレーション結果、右図に実験結果[11]を示している。 10^{13} cm^{-2} から 10^{15} cm^{-2} の幅広いドーズ量に対しても実験結果を再現できていることが見て取れる。

3.3.2. 4H-SiC 基板

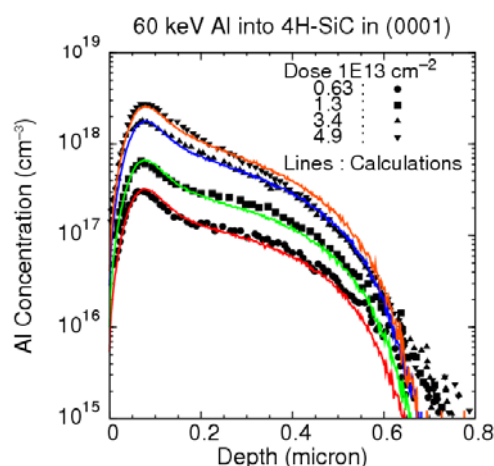


図 8 4H-SiC 基板の(0001)面への Al イオン注入のドーズ量依存性。注入エネルギー:60keV, ドーズ量: $0.63, 1.3, 3.4, 4.9 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$

図 8 に 60keV の Al イオンを(0001)面に注入した際の不純物密度分布のドーズ量依存性を調べた実験結果[12]との比較を示している。ドーズ量はそれぞれ $0.63, 1.3, 3.4, 4.9 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ である。図中の記号 (●, ■, ▲, ▼) は実験値を表し、線はそれらに対応するシミュレーション結果を表している。チャネリング方向へのイオン注入実験との比較であるが、ピーク位置、その高さおよび進入距離まで実験値を良く再現できている。

次に、チャネリング方向からずれた方向へのイオン注入シミュレーションの検証のため、ティルト角をつけた場合のシミュレーションを行った。比較に用いた実験には、(0001)面に向かってティルト角を 9° とし、60keV の Al イオンを注入した場合のドーズ量依存性を調べた実験を用いた[13]。図 9 にその結果を示した。この場合では、ドーズ量はそれぞれ $0.48, 2.1, 5.1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ である。チャネリング方向からティルト角をつけた場合でも、実験値を良く再現できている。

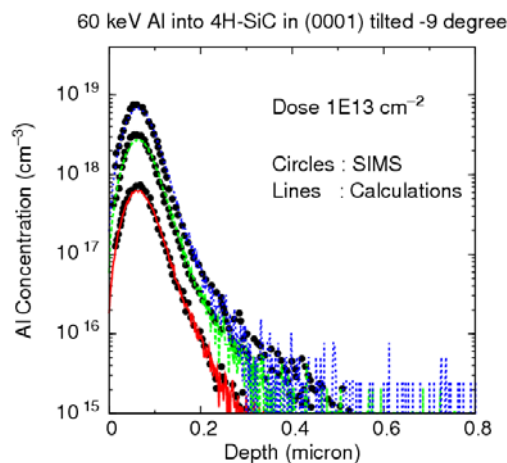


図9 ティルト角 9° をつけた場合の Al イオン注入のドーズ量依存性。エネルギー:60keV, ドーズ量: $0.48, 2.1, 5.1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 。イオン注入面:4H-SiC(0001)。

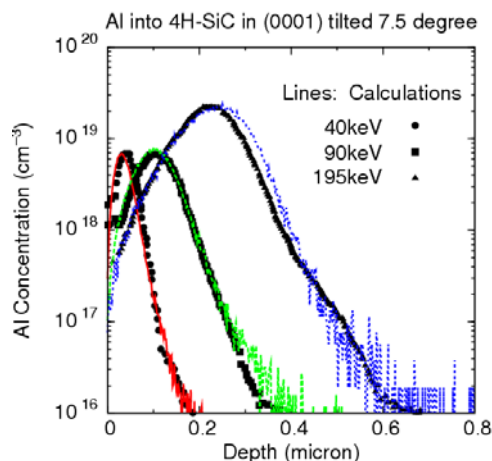


図10 ティルト角 7.5° をつけた場合の Al イオン注入のエネルギー/ドーズ量依存性。エネルギー/ドーズ量 [$\text{keV}/10^{13} \text{ cm}^{-2}$]: 40/3.0, 90/7.9, 195/38。イオン注入面:4H-SiC(0001)。

また、チャネリング依存性と同様に、シミュレーション可能な注入エネルギーおよびドーズ量の範囲の検証を行った。検証比較実験として、(0001)面に向かって 7.5° のティルト角をつけて Al イオンを注入した場合のドーズ量および注入エネルギーの依存性を調べた文献を用いた[13]。実験では、ドーズ量を $3.0, 7.9, 38 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ と変え、それに応じて注入エネルギーを 40, 90, 195keV としている。図 10 にその結果を示した。40, 90keV においては図 8, 図 9 と同様に実験値との良い一致を見せている。エネルギーが 195keV の場合では、

ピークの高さは一致しているが、ピークの位置が実験値と比べると 50nm 程度深い位置に現れている。しかしながら、それ以外の部分では概ね実験値を良く再現できている。図 8, 図 9, 図 10 の結果は、それぞれ注入条件が異なるのみで、2 節で説明した核阻止能、電子阻止能に含まれるパラメーターは全て同じものを用いて得られている。このことから、上記以外のさまざまな注入条件においても、高精度の結果を示すことができると考えられる。以上までは、Al イオンに対するイオン注入シミュレーションの検証を行ってきた。イオン注入シミュレータでは、対応可能な全てのイオン種に対して、同等の計算精度が求められる。以下では、対応可能なイオン種の中から、B, N イオンの検証事例を示していく。

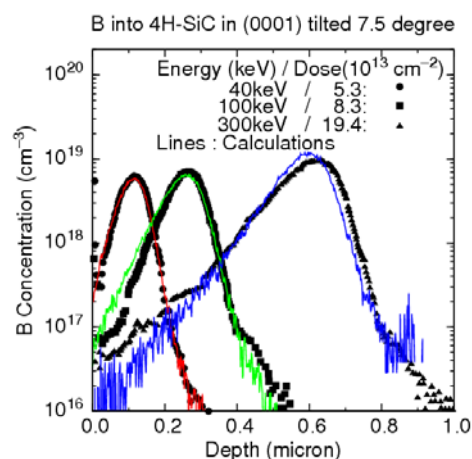


図11 ティルト角 7.5° をつけた場合の B イオン注入のエネルギー/ドーズ量依存性。エネルギー/ドーズ量 [$\text{keV}/10^{13} \text{ cm}^{-2}$]: 40/5.3, 100/8.3, 300/19.4。イオン注入面:4H-SiC(0001)。

図 11 では(0001)面に対してティルト角を 7.5° つけて B イオンをドーズ量および注入エネルギーの依存性を調べた実験[13]との比較を示した。ドーズ量を $5.3, 8.3, 19.4 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ と変化させ、それに応じて注入エネルギーを、40, 100, 300keV と変化させた。図 12 では(0001)面に対して、ドーズ量を $2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ としてエネルギーを変化させて N イオンを注入した実験値との比較を示した[13]。それぞれの注入エネルギーは 30, 100, 190keV である。図 11, 図 12 共に、ピーク位置を再現して

いることから、多様なイオンに対しても、パラメータを適切に調整することで実験値を良く再現することができていることが判る。

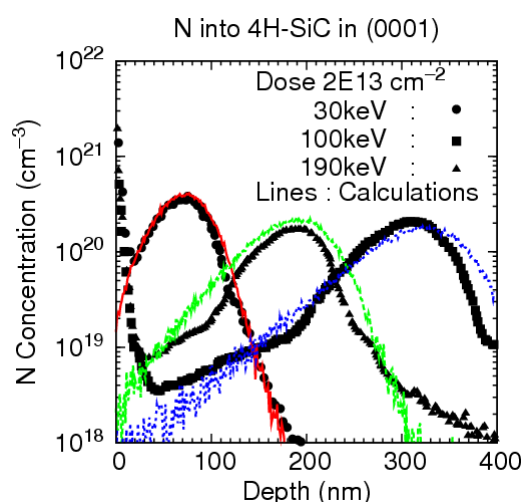


図 12 ティルト角 7.5° をつけた場合の N イオン注入のエネルギー依存性。ドーズ量: $2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, 注入エネルギー: 30, 100, 190 keV。イオン注入面: 4H-SiC(0001)。

3.3.3 3次元構造へのイオン注入

本シミュレータでは、3次元計算による多様な構造に対するシミュレーションを可能である。この項では、その実用性を示すために、複雑な3次元構造へさまざまな注入条件を付加したイオン注入計算の適用事例を紹介する。

まず、Si MOSFET の Extension 形成におけるイオン注入の計算事例を示す。形成する MOSFET の全体図を図 13 に示した。

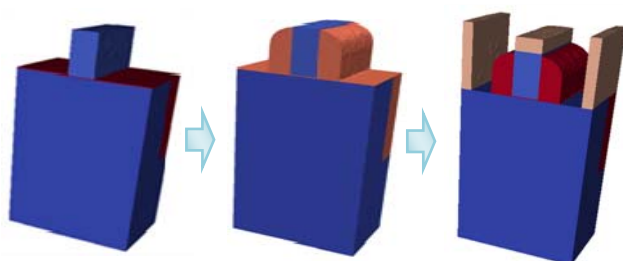


図 13 4H-SiC MOSFET の全体図。左から、Extension と拡散層へのイオン注入時の構造および電極を取り付けた全体図。

イオン注入の目的は、元々、ソース・ドレイン拡散層形成や、基板のチャネル部分へのパンチスル

一の制御などにある。MOSFET の短チャネル効果は、ソース・ドレイン拡散層の接合の深さ、ゲート下へのしみ出した量に大きく依存する。今回は、図 13 の左部に描かれている、4H-SiC 基板の (0001) 面に対してポリシリコンをマスクとして堆積させ、その全面に SiO_2 犠牲膜を 2nm 堆積させた構造を用意した。イオン注入の条件として、Al イオンを 5.0keV、ドーズ量を $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ 、ティルト角を $0, 18^\circ$ とした 2 ケースを用意し、ゲート下へのしみ出しへのティルト角依存性を検証した。その結果を図 14 に示した。

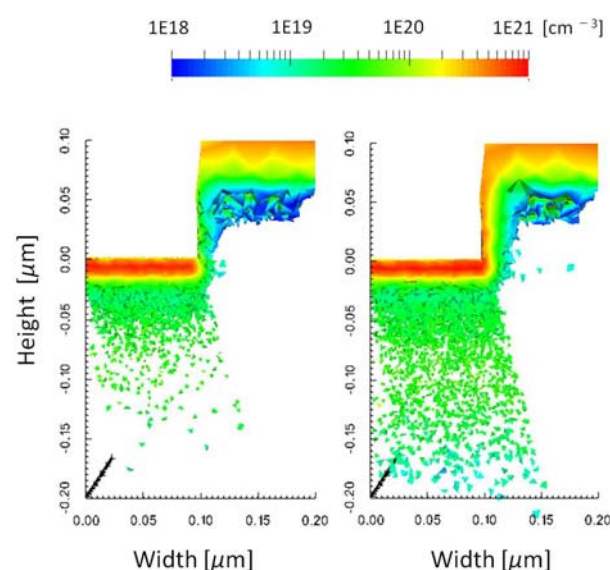


図 14 4H-SiC MOSFET の Extension 層へのイオン注入におけるティルト角依存性。ティルト角: 左側 0° , 右側 18°

図 14 の左側がティルト角を 0° とした場合、右側がティルト角を 18° とした結果である。図 14 では、図 13 の全構造の幅方向に対して、半分の部分を切り出して表現している。図中の X 軸は [1000] 軸、Z 軸方向は [0001] 軸を表している。ティルト角を 0° とした場合には、主に [0001] 方向へのチャネリングが見られる。それ以外にも、ティルト角を 18° とした場合の [11-23] 軸へのチャネリングも多少見られる。逆に、ティルト角を 18° とした場合には、主に [11-23] 軸へのチャネリングが見られ、[0001] 軸へのチャネリングも同様に多少見られる。これは、結晶構造を考慮した 2 体散乱を正確に解くことで、1 次チャネリングのみなら

ず2次チャネリングの影響も反映されていることを表している。このような詳細なチャネリングの影響を考慮できることは、モンテカルロ法による3次元シミュレーションの利点の1つである

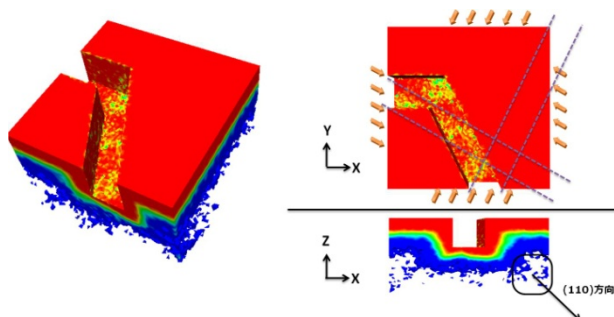


図 15 Si 基板の六角トレンチ構造へのティルト角を 15° 、ローテーション角を $0, 90, 180, 270^\circ$ の4方向からのイオン注入による不純物密度3次元分布。左側:全体俯瞰図, 右側上部: XY 平面, 右側下部: ZX 平面

次に、Si 基板の六角トレンチ構造へ、ティルト角とローテーション角を付加したイオン注入シミュレーション事例を紹介する。図 15 の左側に計算を行った後の不純物濃度分布およびトレンチ構造の鳥瞰図を示した。本シミュレータでは、反射境界条件を適用できるため、図のような構造によりシミュレーションが可能である。イオン注入条件として、Si 基板の(100)面 (の XY 平面) に対して、ローテーション角を $0, 90, 180, 270^\circ$ の4方向とし、その上でティルト角を 15° 、注入エネルギーを 5keV とした B イオンを注入する計算を行った。図 15 の右側上部に、イオン注入後の XY 平面上部から俯瞰した不純物密度分布を示した。トレンチ内部に濃度の濃淡が現れているのが見られる。これは、ティルト角をつけたことにより、トレンチの壁の影となる領域が発生していることを表している。影となっている領域においてもイオンが入射されている理由は、2通りの2次照射の影響が反映されたためである。1つは、基板内を通過したイオンがトレンチの壁を突き抜けて入射された場合である。もう1つは、溝の側壁を反射して入射された場合である。これらは、3次元イオン注入シミュレーション固有の結果で

ある。図 15 の右側下部に、右側上部の点線における ZX 平面で切り取った場合の不純物密度分布を示した。ティルト角をつけたイオン注入であるため、[001]軸への1次チャネリングは多少抑制されているが、[101]軸への2次チャネリングが見られる。これは、MOSFET の計算事例で示したように、高次チャネルへの予測が可能であることを示している。

3.4. まとめ

本稿では、われわれの開発した3次元 TCAD システムのイオン注入機能の紹介を行った。Si, 4H-SiC 基板への適用のために、さまざまなイオン注入の実験との比較を行うことで、われわれの調整したパラメータセットの汎用性およびシミュレーションの妥当性を示した。また、われわれのシミュレータの特徴である3次元構造に対するシミュレーションの事例として、4H-SiC 基板の MOSFET の Extension 層へのイオン注入におけるティルト角依存性を検証した事例と、Si 基板の六角トレンチ構造への複雑な条件のシミュレーション事例を示した。これらの計算事例から、われわれの開発した3次元 TCAD システムでは、多様な注入条件および複雑な3次元構造の影響を考慮した3次元イオン注入シミュレーションが可能であることを示した。

4. 形状変形モデル

4.1. 概要および目的

半導体デバイス製造工程を計算機上でシミュレートするためには、工程の段階に応じたデバイス形状の変形を計算する機能が必須である。形状変化の計算手法としては大きく分けて2種類 - 物理的手法および幾何学的手法 - が存在する。物理的手法では加工に利用している物理現象に忠実なモデルを元にして計算を行う。一方、幾何学的手法では物理現象に忠実なモデル化は行わず、製造したいと考える理想的な形状が立体構造として実現するようなモデル化をして計算を行う。物理的手法での計算のほうが実際の工程に近いシミュレーションが可能となると考えられるが、一

一般的に高い計算コストを必要とする。一方、幾何学的手法での計算は、シミュレーションの結果として得られる形状が理想的になりがちではあるものの、計算コストは比較的少なくて済む。3次元でのデバイスシミュレーションのような規模が大きいシミュレーションを行う場合には計算速度が重要になってくる。Advance/TCAD プロセスシミュレータではそのような大規模計算での利用を見据え、幾何学的手法による形状変形計算を採用している。本説明書はその計算モデルを記述したものである。

4.2. 計算モデル

4.2.1. モデルの概要

以降の節で詳しく説明するが、Advance/TCAD プロセスシミュレータの形状変形計算は、以下の図にあるように、

- A) ガス界面やマスクエッジからの距離を元に格子点の距離関数を求める
- B) 要素の距離関数値に応じて新たな界面の格子点を求める
- C) 新たな格子点を用いて要素の分割を行う
- D) 材質情報の変換が必要な要素に対しては、その情報を書き換える

という手順を繰り返すことで、実現される。

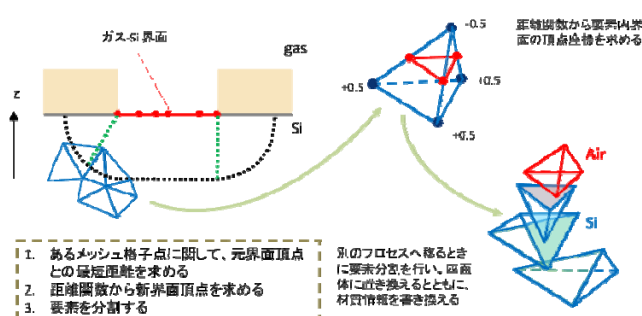


図 16 モデルの概要

4.2.2. 距離関数法

Advance/TCAD プロセスシミュレータの形状変形計算では、新たに考案した幾何学的な計算モデル（本書では距離関数法モデルと呼ぶ）を用いている。距離関数とはレベルセット法で用いられるレベルセット関数と同等の概念を持つ量であり、形状変形後のガスと材質の界面（以降は単に界面

と書かれていたらガスと材質の界面を指すことにする）の上では値がゼロであり、その他の点では界面からの符号付き距離となる量である。（符号は界面を境に、材質の転換が発生する領域では負、発生しない領域では正と定義される。）例えば図 17 左のように既に存在している材質 A（図の塗りつぶし領域）の上に、図 17 右のように材質 B（図の斜線領域）をある厚さだけデポジションさせることを考える場合、図 17 中央の破線が距離関数値ゼロの点の集合である。また、図 17 右の斜線や塗りつぶした領域にある点は距離関数が負値に、白色の領域にある点では正值となる。（本書では説明の分かり易さのために、2次元平面に射影したかのような図を用いて解説を行う。）

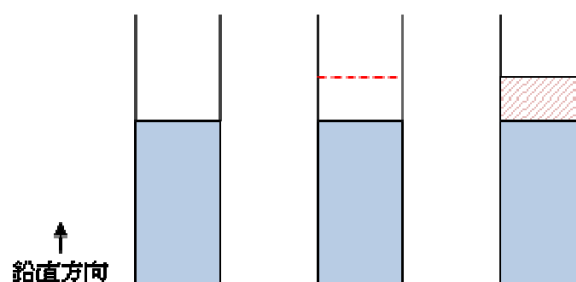


図 17 距離関数

すなわち、界面は変形前の界面を何らかの形で反映した位置に作られる。言い換えると、ある点の距離関数の値は変形前の界面等の情報を元に、変形の種類に応じたアルゴリズムによって計算できることになる。

解析領域内の各点の距離関数値が求めればその情報を元に材質変換を行い、新たな界面を構成することができる。計算機シミュレーションでは解析領域を離散的な要素に分割して計算するが、1つの要素に属する節点での距離関数値に応じて、その要素の変換を行うことが基本的な考え方となる。具体的には要素に属する全ての節点の距離関数値が負であれば、その要素の領域は全て変換されることになり（図 18 の白抜きの三角形）、また、正值と負値の両方を持っていれば要素内に界面が形成されることになる（同図の斜線の入った三角形）。要素内に界面が形成される場合には元の要素を界面で分割し、片方の材質を変換する。

界面の位置は節点の距離関数値を用いた内挿で求めることができる。

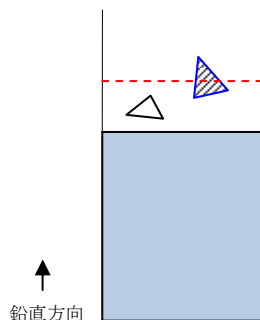


図 18 要素の変換：破線は距離関数値がゼロの点集合

マスクを用いた形状変形シミュレーションを行うためには、より複雑な手順を踏む必要がある。それは高さ方向の界面移動だけでなく、マスクによってデポジションやエッチングが遮られる領域と遮られない領域の界面形成も行う必要があるからである。凹部構造への等方性デポジション（第3節）の表現性を高めるためにも同様の手順が必要になる。このような状況を実現するために1つの点に対して複数の距離関数値を設定することにする。これらの値は変形前の界面に依存して決められるものやマスク辺によって決められるものということになる。そして、要素とマスク辺との位置関係やマスクの陰陽などに応じた適切な順序で界面生成と材質転換を行うときに用いられる。

例えばマスクの角が引き起す形状変化を表現するためには以下のように考える。（図19はマスクの左上側を材質変換の対象とすることを想定して書かれている。）図19左のようにマスク（黒辺で縁取られた左上の領域）の角にかかっている要素（白抜きの三角形）を考える。（図は上から見た状態である。）最終目標は白抜きの三角形の辺と黒辺で囲まれた領域の材質のみを転換させることであるが、以下で説明するように2段階に分けて実現させる。まず、マスクの角を構成するマスク辺の片方に注目する（図19中央）。この辺（図19中央の縦線）を通る面を元に計算される

距離関数の値を用いれば要素を2分することができる。次に2分された各々の要素をもう一方のマスク辺に注目して分割する（図19右）。マスクの内側を対象にする場合は、どちらのマスク辺から見ても距離関数が負である領域が対象となり、4つに分割したうちの1つのみがそれである。図示してはいないが、マスクの外側を変換対象とする場合は、少なくとも片方のマスクから見て距離関数が負の領域を対象にすればよいから、図19と同様の位置関係であれば4つに分割したうちの3つの領域が材質転換の対象となる。最後に、界面からの距離に応じた処理 - 必要ならば要素分割を行い、適切な領域の要素のみを材質転換 - を行う。

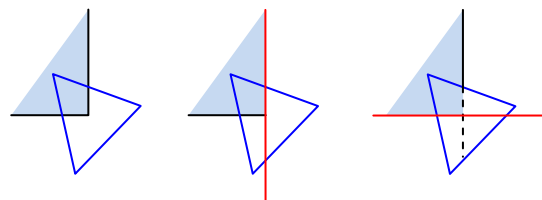


図 19 マスクがあるときの変形操作手順の例

上記の説明は要素分割を全て完了してから材質転換すべき分割要素を転換するように書かれているが、連続する分割の関係性を考慮しながら分割操作毎に転換させていくように考えることも可能である。図19の場合で言えば、2回目の転換は最初の転換を行った要素にのみ作用させればよい。また、2つの転換領域の積の要素に転換が起こると表現してもよい（図20上）。一方、マスクの外側を転換する場合は、最初の転換を行う要素にも2回目の転換を行う要素にも作用させることになり、2つの転換領域の和の要素に転換が起こると表現できる（図20下）。

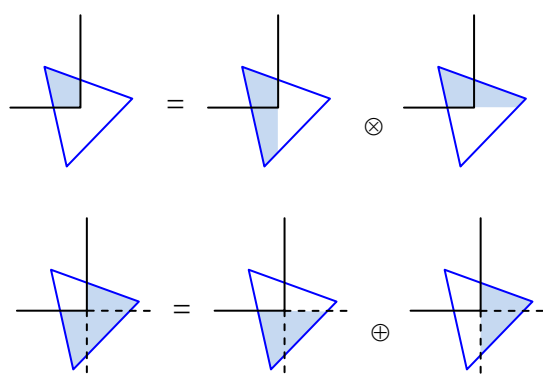


図 20 材質転換操作の積/和表現

4.2.3. 要素の分割についての補足

前節では形状表現のために最低限必要な要素の分割方法の例を示したが、これら以外にも要素の分割過程が2つ存在する。1つは要素タイプを四面体のみにするための分割であり、もう1つはこれらの過程によって分割された要素と面を共有する要素の分割（面の整合性を保つ為の分割）である。

前者については以下の表のように分類できる。

表 1 要素タイプを四面体のみにするための分割

節点の距離関数値の数	新たに生まれる節点の数	2分した後 の要素タイプ の組	最終的に 生成される 四面体の 数
(正, 零, 負)=(1, 2, 1)	1	四面体2つ	2
(正, 零, 負)=(2, 1, 1)ま たは(1, 1, 2)	2	四面体と 四角錐	3
(正, 負)=(1, 3) または(3, 1)	3	四面体と 三角柱	4
(正, 負)=(2, 2)	4	三角柱2つ	6

四角錐と三角柱を四面体に分割するには四角形の面を隣り合う要素同士で同じ対角線で切らなければならないがこれは文献[14]に従って以下のようにする。はじめに、既存の節点全てと新たに生まれる節点全ての両方を同時に順序付けする。（座標値の大小関係や節点のインデクスなどからつける方法が考えられる。）そしてある要素タイプの四角形の面に着目したときに、その順序が最も大きい節点から向い合う節点へと切れ目

を入れるようにする。順序付けは解析領域全体で定義されているので分割処理を各要素で個別に行っても結果的に隣り合う要素同士で同じ対角線で切断されることが保証される。

ここまでは同じ要素に対して要素分割と材質転換が発生する場合についての説明を行った。このような要素に隣接する要素は節点の距離関数値の関係でみたら例え要素分割を行わなくてもよいものであっても、面の整合性を保つために、分割が発生する。面上の切断箇所は線分しか与えられないので、要素としての分割面を確定させるためにはもう一点追加する必要があるが、分割が隣接要素に派生していくのを防ぐために、整合性を保つことになった面に対面する要素の節点を分割点に追加する。図 21 のように、四面体 ABCD が面 abc で要素分割および材質転換されるが四面体 BCDE は距離関数値ではそれらが不要ない場合を想定している。このような場合にも面 BCD は辺 ab（および四角形 abDC のどちらかの対角線）によって切断されるから四面体 BCDE も分割することになり、これを派生と呼んでいる。このとき面 BCD に対面する節点 E を四面体 BCDE の分割面の通る点と扱い、面 abE を分割面とする。こうすることで四面体 BCDE からさらに分割が派生することはなくなる。

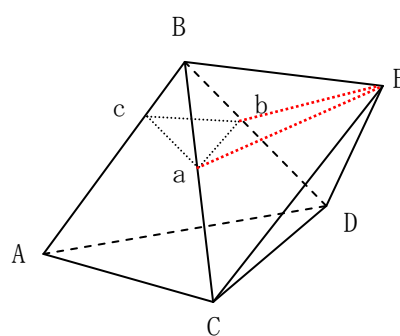


図 21 隣接要素への分割の派生

4.2.4. 距離関数補正

幾何学的に厳密な要素分割を行うと状況によってはサイズの小さい要素が生成されることになる。小さな要素の存在は、形状変形のみを行う分にはあまり問題をおこさないが、イオン注入や

不純物拡散といった他のプロセス工程のシミュレーションの場合には問題となり得る。この問題を回避する1つの手段として距離関数の補正を行えるようにする。

距離関数の補正アルゴリズムは2種類 - 界面補正と節点補正 - を考える。界面補正は、距離関数の値からは界面が要素と交差するはずの状態を界面が要素の頂点を通るように移動させることで行われる (図 22)。これは節点の距離関数の値をゼロに設定し直すことで実現できる。

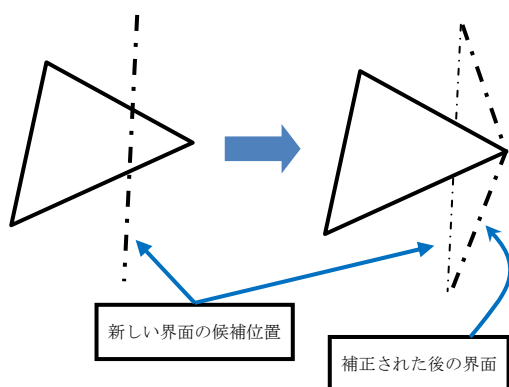


図 22 界面補正

一方、節点補正では節点を界面に乗るように移動させることで切断が起こらないようにする。(図 23)

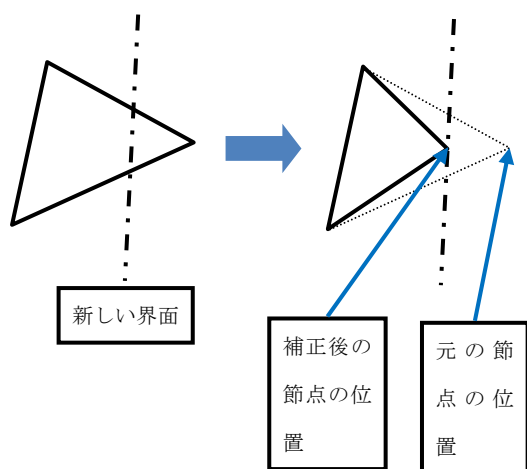


図 23 節点補正

これらの補正は要素分割を抑制するため、要素

数の増加を抑え、要素の形状が保たれる傾向を導くが、界面補正の場合であれば形状表現の精度が落ちたり、また、節点補正の場合であれば要素サイズのバランスが崩れ、時には体積がゼロの要素を生むことになったりとデメリットも存在する。

4.2.5. デポジションとエッチングのモデル

形状変形には大きく分けて2つ - デポジションとエッチング - の工程がある。デポジションでは等方性モデルと平坦化モデルを考える。等方性モデルは界面から厚さが一定の堆積を行うモデルである。エピタキシャル成長のように、ある特定の材質とガスとの界面に限定して堆積を行わせることもできる。また、物理的には鉛直方向の堆積と水平方向の堆積とで厚みが変わる場合があるため、それを考慮可能なモデルとする。平坦化モデルは界面形状とは無関係に、解析領域のある高さまで材料を堆積させるモデルである。

エッチングには等方性モデル、異方性モデル、平坦化モデルが存在している。等方性モデルは界面から一定の厚さまで材質を削るモデルである。ある特定の材質だけを削ることも可能である。また等方性デポジション同様、鉛直方向と水平方向とで削られる量が変わる場合があるため、それを考慮することにする。異方性モデルは界面から鉛直方向に一定の厚さだけ削るモデルである。平坦化モデルは、化学機械研磨のように界面形状とは無関係に解析領域のある高さまで削るモデルである。

なお、利便性のため、ガスに接している特定の材質を取り除く除去操作も用意する。この操作は距離関数を計算することなく処理できる。また便宜上エッチングに分類して扱うことにする。

4.3. 計算手法

前節の説明から距離関数値（の組）が与えられれば後の計算は幾何学的にはほぼ自明であると思われるため、この節では、各モデルにおける距離関数値の計算について述べることにする。

節点での距離関数を計算するための界面情報は界面パッチ集合から得られる。パッチとは要素

の面のことであり、界面パッチとは隣り合うガス要素と材質要素に共通の面のことである。

4.3.1. デポジション

(1) 等方性モデル

デポジションの等方性モデルは界面からの距離が一定の所まで堆積させるモデルであり、距離関数は以下のように決定される。はじめに界面パッチ集合を作成する。その後、界面パッチをその向きに応じて部分集合に分けておく。(パッチの向きの定義は堆積する方向とする。) 次に、その部分集合毎に、各節点と界面パッチとの距離の最小値を求める。(距離の計算は堆積の異方化率を考慮する。) 最後にその値から堆積させる厚さを引く。界面パッチ集合を部分集合に分けるのは、段階的に要素分割および材質変換を行うことで、図 24 に示した角の部分のような形状表現の精度を上げるためである。

対象材質を指定する場合は、はじめに作成する界面パッチ集合を対象材質要素とガス要素を両側に持つパッチのみで構成する。

マスクがある場合は、はじめに作成する界面パッチ集合をマスク内に限定する。また、距離関数計算においてマスク辺による値も計算し、それらによる要素分割および材質変換も行う。

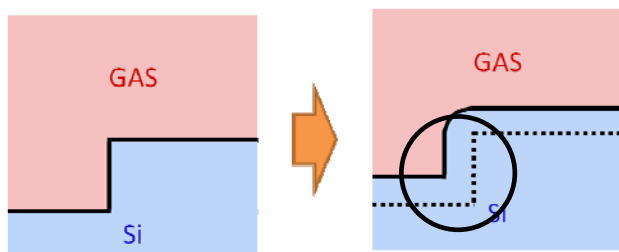


図 24 等方性デポジションのイメージ図

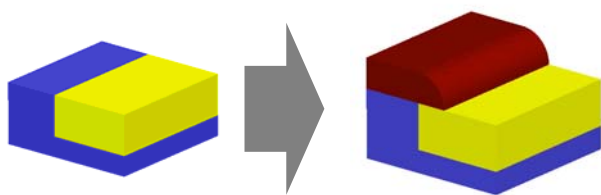


図 25 対象材質を指定した等方性デポジションの例

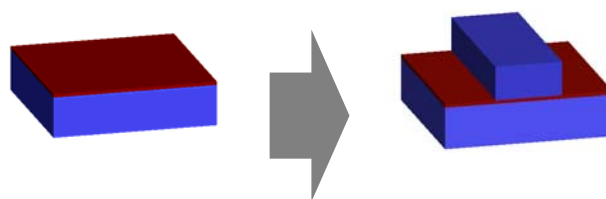


図 26 マスク指定がある場合の等方性デポジションの例

(a) RATIO=1.0

(b) RATIO=0.5

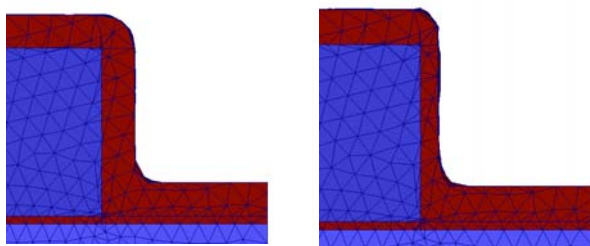


図 27 異方化率の違いによる等方性デポジションの違いのイメージ図

(2) 平坦化モデル

デポジションの平坦化モデルは解析座標系のある z 座標値まで、もしくは、ガス相の最下点を基準とした厚み指定で堆積させるモデルである。後者の場合も前者に帰着できる為距離関数の計算方法は 1 つで済む。堆積した後の堆積物の最高点の z 座標を z_0 、各節点の z 座標を z_p とすると距離関数は $z_p - z_0$ で与えられる。

平坦化デポジションではマスクは利用できない。

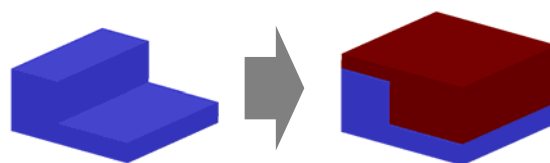


図 28 平坦化デポジションの例

4.3.2. エッチング

(1) 等方性モデル

エッチングの等方性モデルは界面から一定の厚さまで材質を削るモデルであり、距離関数は以下のように決定される。はじめに界面パッチ集合を作成する。次に、各節点と界面パッチとの距離

の最小値を求める。距離の計算は堆積の異方化率を考慮する。) もし節点が界面パッチの上方にある場合には符号をマイナスにする。最後にその値から削る厚さを引く。

対象材質を指定する場合は、はじめに作成する界面パッチ集合を対象材質要素とガス要素を両側に持つパッチのみで構成する。

マスクがある場合は、マスク内部に限定して界面パッチ集合を作成し、あとは上記の手順と同じようにする。

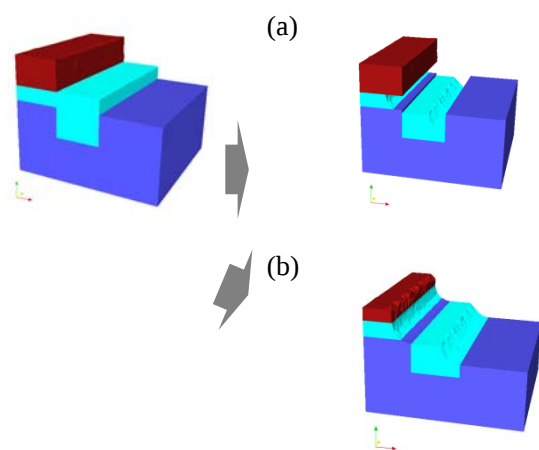


図 29 等方性エッチングの例。(a)対象材質を 1 つ指定。(b)全ての材質を対象として指定。

(2) 異方性モデル

エッチングの異方性モデルは界面から鉛直方向に一定の厚さだけ削るモデルであり、距離関数は以下のように決定できる。はじめに界面パッチ集合を作成する。次に、パッチを全て、削る厚さだけ $-z$ 軸方向に平行移動させる。そして、移動後のパッチ集合と節点との距離を全てのパッチに対して計算し、最も小さい値を距離関数の絶対値とする。符号は、移動後のパッチ集合よりも上方にあれば負、下方にあれば正とする。

マスクがある場合は、マスク辺による距離関数も計算し、それらによる要素分割および材質変換も行う。

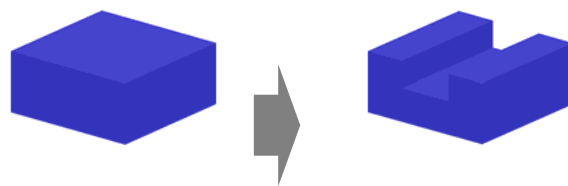


図 30 異方性エッチングの例 (その 1)

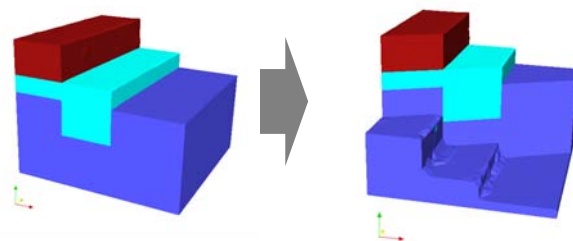


図 31 異方性エッチングの例 (その 2)

(3) 平坦化モデル

エッチングの平坦化モデルはデポジションの場合と同様に、解析座標系のある z 座標値まで、もしくは、ガス相の最下点を基準とした厚み指定で削るモデルである。後者の場合も前者に帰着できる為距離関数の計算方法は 1 つで済む。削った後のガス相の最下点の z 座標を z_0 、各節点の z 座標を z_p とすると距離関数は $z_0 - z_p$ で与えられる。

平坦化エッチングではマスクは利用できない。

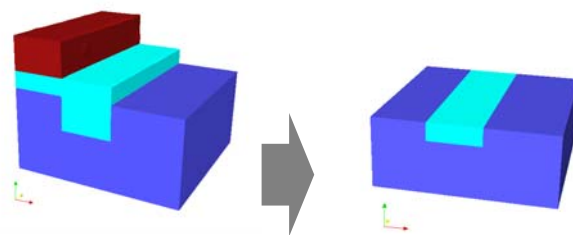


図 32 平坦化エッチングの例

4.3.3. 除去

前節でも述べたように、除去は距離関数を計算することなく処理できる操作である。ガスに接している対象材質要素および、その要素に連結している全ての対象材質要素全体をガスに転換させるように処理する。

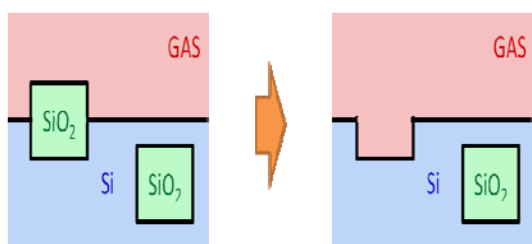


図 33 除去操作のイメージ図

5. シリコン熱酸化過程の解析

5.1. はじめに

電氣的・機械的・熱的・化学的特性の優れた絶縁体の SiO_2 を熱酸化により形成して、 Si を半導体素子に組み立てる上で実用上非常に有益な効果として利用されている。この製造工程においてシリコン基板内発生する応力は半導体素子の電氣的特性に影響を与えることがあり、そのためシリコン基板に働く応力を把握することが半導体素子の信頼性確保のために重要である。

シリコンの熱酸化過程は以下の3つの物理現象からなる(i) 酸素は予形成された酸化膜中の拡散。(ii) Si-SiO_2 界面の酸化反応。(iii) 酸化膜の体積膨張。数学的にはこの三過程を偏微分方程式を用いて表現し、この3つの偏微分方程式を解けばよい。ただし、酸素の拡散速度と比べ、 Si-SiO_2 界面の酸化反応十分速いため、本解析システムでは Si-SiO_2 界面の酸化反応過程を考慮せず、酸素拡散/変形連成解析のみ考慮している。

5.2. 定式化

5.2.1. 酸化過程の解析

酸化シミュレーションでは酸化膜中の酸化種の拡散を解いて酸化種の濃度分布を求め、 Si/SiO_2 界面を追跡し、酸化膜内酸化種の濃度分布の時間変化を計算する。酸化膜の拡散の速さは酸化膜の成長に比べて十分早く酸化種の濃度分布は定常状態に達していると考えられるので、次の定常状態の拡散方程式を解いて酸化種の濃度分布を求める。

$$\nabla(D\nabla C) = 0 \quad (58)$$

ここでは C および D は酸化種の濃度および拡散係数である。または、考慮すべき境界条件は境界面

$\partial_I \Omega$ における指定酸素濃度、境界 $\partial_{II} \Omega$ および $\partial_{III} \Omega$ における酸素流出や境界 $\partial_{IV} \Omega$ における相界面移動である。ここで $[[X]]$ は相界面における不連続量を示している。

$$C(x, t) = C_I(x, t) \quad \text{on } \partial_I \Omega \quad (59)$$

$$-D\nabla C \cdot \mathbf{n} = Q_{II}(x, t) \quad \text{on } \partial_{II} \Omega \quad (60)$$

$$-D\nabla C \cdot \mathbf{n} = h(C - C^*) \quad \text{on } \partial_{III} \Omega \quad (61)$$

$$[[C]]\mathbf{v} - [[D\nabla C \cdot \mathbf{n}]] = 0 \quad \text{on } \partial_{IV} \Omega \quad (62)$$

ここでは $\mathbf{n}$ は Si-SiO_2 相界面の法線方向であり、 $\mathbf{v}$ は相界面移動速度、 h は質量輸送係数である。気相中酸素の濃度 C^* はヘンリーの法則より表す。

$$C^* = K_H p \quad (63)$$

ここでは p は酸素の分圧、 K_H は比例定数である。

上記方程式の弱形式は以下である。

$$\int_{\Omega} D\nabla C \nabla \delta C d\Omega = - \int_{\partial_{II} \Omega} Q_{II} \delta C d\Gamma - \int_{\partial_{III} \Omega} k(C - C^*) \delta C d\Gamma \quad (64)$$

本解析システムは有限要素法を利用し上記方程式を解く。ただし、Stefan 条件式(62)は下節に示したように直接 Si-SiO_2 相界面を算定する方法を用い考慮した。

5.2.2. Si-SiO_2 相界面の算定

Si-SiO_2 相界面の現位置は既知とし、 SiO_2 の遷移幅 s は下式のように計算し、時間増分 Δt 後の Si-SiO_2 相界面位置が決められる。

$$s = \frac{k_s C}{N_1} \Delta t \quad (65)$$

ここでは k_s は界面反応速度定数、 C は SiO_2 側界面位置酸素濃度、 N_1 は単位体積の酸化膜中に含まれる酸化種分子である。

本解析システムでは、 Si-SiO_2 相界面位置が決めた後、相界面は要素面と合うようにメッシュを切り直す。

5.2.3. 変形解析

酸化解析から得られる相界面の移動情報から、相変態の領域を特定できる。相変態の体積変化よ

り、シリコン基板変形するので、その変形解析の基本方程式以下である。

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} = 0 \quad (66)$$

ここでは $\boldsymbol{\sigma}$ と $\mathbf{b}$ はそれぞれ Cauchy 応力と体積力である。この方程式の弱形式は

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon} d\Omega = \int_{\Gamma} \mathbf{t} \delta \mathbf{u} d\Gamma + \int_{\Omega} \mathbf{b} \delta \mathbf{u} d\Omega \quad (67)$$

である。ここ $\boldsymbol{\varepsilon}$ では微小変形ひずみであり、 $\mathbf{t}$ は表面外力である。本解析モデルでは相変態の体積変化による影響は体積力 $\mathbf{b}$ として上記方程式に代入する。

ただし、大変形を、すなわち幾何非線形を考慮する時式(67)に示した Cauchy 応力や解析領域 Ω や解析境界 Γ は全て変形後の配置に対応する必要があるため、式(67)を現配置を下記直す必要があり、これは

$$\int_{\Omega_0} \mathbf{S} : \mathbf{E} d\Omega = \int_{\Gamma_0} \mathbf{t} \delta \mathbf{u} d\Gamma + \int_{\Omega_0} \mathbf{b} \delta \mathbf{u} d\Omega \quad (68)$$

である。ここでは $\mathbf{S}$ は第2Piola-Kirchhoff 応力、 $\mathbf{E}$ は Green-Lagrange ひずみであり、 Ω_0 と Γ_0 はそれぞれ既知配置の解析領域と境界である。式(68)は本解析システムを変形解析を行う際の基本方程式である。

式(68)を解くため、相変態の体積変化からもたらした体積力 $\mathbf{b}$ を指定する必要があるほか、変形する材料の構成式も知る必要がある。本解析システムは以下の3種類の材質を指定することができる。

1) 等方性弾性

等方性弾性材は以下のようなひずみ-応力関係式を持つ

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D} : \boldsymbol{\varepsilon} \quad (69)$$

また、弾性マトリクス $\mathbf{D}$ はラーメ定数 λ と μ より表現することができる

$$\mathbf{D} = \lambda(\text{tr} \boldsymbol{\varepsilon}) + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon} \quad (70)$$

2) 直交異方性弾性

シリコンは強い異方性を持つので、本解析システムは以下の直交異方性弾性構成式を利用している。

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_1} & \frac{\nu_{21}}{-E_2} & \frac{\nu_{31}}{-E_3} \\ \frac{\nu_{12}}{-E_2} & \frac{1}{E_2} & \frac{\nu_{32}}{-E_3} \\ \frac{\nu_{13}}{-E_3} & \frac{\nu_{23}}{-E_3} & \frac{1}{E_3} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{1}{G_{12}} \\ \frac{1}{G_{23}} \\ \frac{1}{G_{31}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{12} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \end{bmatrix} \quad (71)$$

3) 等方性粘弾性

粘弾性材料構成式は時刻 0 から t までの変形勾配テンソル $\mathbf{F}$ の関数 $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{f}(\mathbf{F}_{t=0}^t)$ であり、この非線形関数は数学的に以下の級数

$$\boldsymbol{\sigma} = \int_0^t G_1(t-\tau_1) \mathbf{F}(\tau_1) d\tau_1 + \int_0^t \int_0^t G_2(t-\tau_1, t-\tau_2) \mathbf{F}(\tau_1) \mathbf{F}(\tau_2) d\tau_1 d\tau_2 + \dots \quad (72)$$

で表すことができるが、その材料係数 G_1 や G_2 などの取得や相関計算は煩雑であるため、一般的にはこの級数の第一項のみを考慮する。

$$\boldsymbol{\sigma} = \int_0^t G_1(t-\tau_1) \mathbf{F}(\tau_1) d\tau_1 \quad (73)$$

この式は準線形粘弾性モデルである。本ソフトでは、上記リラクゼーション係数 G を以下の Prony 級数を利用し表している。

$$G(t) = G_0 \left[\mu_0 + \sum_{i=1}^m \mu_i \exp(-t/\lambda_i) \right] \quad (74)$$

ここでは、 G_0, μ_m や λ_m は材料係数であり、この粘弾性モデルは一般化した Maxwell モデルと呼ばれる。

5.3. 解析の流れと解析例

5.3.1. 解析の流れ

図 34 は解析流れ図を示している。ここに示したように本解析は方程式(式 64), (65)と(68)を順次に解く形になっていて、一方向の連成解析システムになっている。酸化過程では、酸素濃度、不純物濃度や応力は各材料定数に影響するだが、この一方向の連成解析システムでは一ステップ遅れてその影響を考慮することになる。

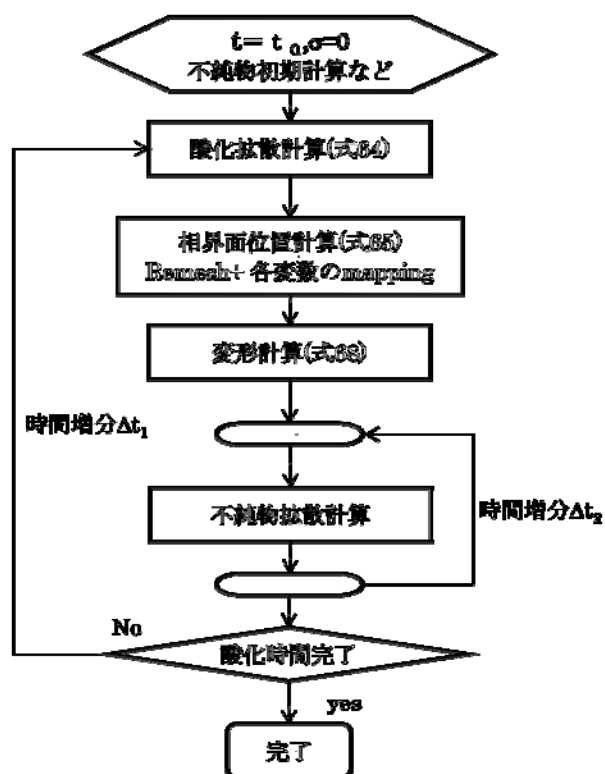


図 34 解析流れ図

微分方程式(64)と(68)を有限要素法を用いて解いている、現時点では四面体1次要素のみを使っている。また、材質や境界条件の変化、幾何非線形の考慮より、微分方程式(64)と(68)は非線形であるため、本解析ソフトは Newton-Raphson 法を採用し、収束計算を行う。

5.3.2. 解析例

酸素拡散 → 相変態 → 体積膨張 → 変形の一連の解析例を以下に示す。

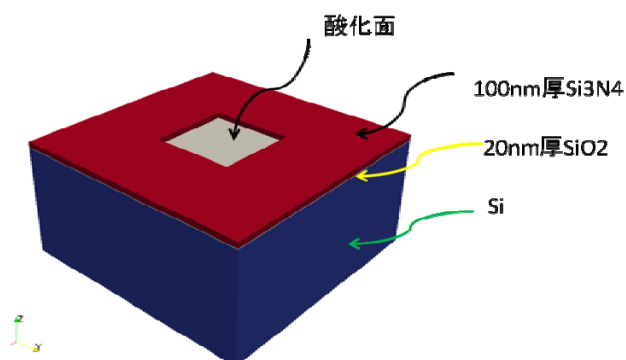


図 35 酸化前の形状

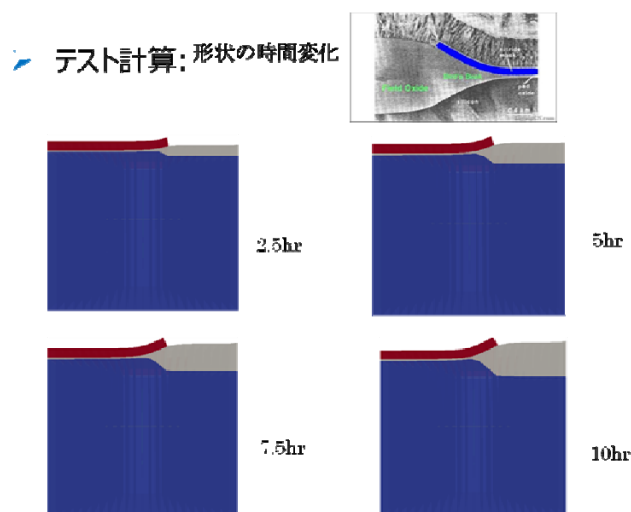


図 36 酸化過程中的形状変化

6. まとめ

Advance/TCAD プロセスシミュレータの、不純物拡散、イオン注入、堆積/エッチング、酸化の機能を紹介した。新たに考案した幾何学的な計算モデルを採用し、高い形状表現力を達成している。シリコンだけでなく六方晶系結晶材質にも適用可能であり、イオン注入の結果を示した。

参考文献

- [1] H. Sakamoto, et.al., SISPAD, pp.137-140 (1997).
- [2] Fair, R. B., "Concentration Profiles of Diffused Doants In Impurity Dopant Processes in Silicon", pp.315-442, Amsterdam: North-Holland 1981
- [3] J. F. Ziegler, J. P. Biersack, M. D. Littmark, "SRIM", ISBN-13 978-0-9654207-1-6, 2008
- [4] J. Lindhard, M. Scharff and M. Schiott, "Range concepts and heavy ion ranges", Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Sclsk. vol.33, pp.1-42, 1963
- [5] B. Firsov, "A qualitative interpretation of the mean electron excitation energy in atomic collisions", Zhur. Eksptl'. i Teoret. Fiz. vol.36, 1959
- [6] S. J. Morris, B. Obradovic, S.-H. Yang and A. F. Tasch, "Modeling of Boron, Phosphorus, and Arsenic implants into single-crystal silicon over a wide energy range", IEDM Tech. Digs., pp.721-724, 1996
- [7] M. J. Norgett, M. T. Robinson and I. M. Torrens,

- “A proposed method of calculating displacement dose rates” , Nuclear Engineering and Design, vol.33, pp.50-54, 1975
- [8] G.Hobler *et.al.*, “Modeling of Ultra-Low Energy Boron Implantation in Silicon” , IEDM 97, Tech. Digs., pp.489-492, 1997
- [9] L. Rubin, W. Shaw *et.al.*, “Ranges and Moments of Depth Distributions of Boron and Phosphorus Implanted into Silicon in the Energy Range 1. 7 - 5.0 MeV with an Eaton NV -GSD/VHE Implanter” , 11th International Conference on Ion Implantation Technology, pp.567-570, 1996
- [10] Shyh-Horng Yang *et.al.*, “Monte Carlo Simulation of Arsenic Ion Implantation in (100) Single-Crystal Silicon” , IEEE Trans. Semicond. Manuf. vol.9, pp.49-58,1996
- [11] A.Simionescu *et.al.*, “Modeling of electronic stopping and damage accumulation during arsenic implantation in silicon” , Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, vol.100, pp.483-489, 1995
- [12] J. Wong-Leung *et.al.*, “Effect of crystal orientation on the implant profile of 60 keV Al into 4H-SiC crystals” , Journal of Applied Physics, vol.93, pp.8914-8917, 2003
- [13] Sang-Sun Lee *et al.*, “Empirical Depth Profile Model for Ion Implantation in 4H-SiC” , Journal of the Korean Physical Society, vol.41, pp591-593, 2002
- [14] How to Subdivide Pyramids, Prisms, and Hexahedra into Tetrahedra、Dompierre, Julien, Paul Labbe, Marie-Gabrielle Vallet and Ricardo Camarero, Proceedings, 8th International Meshing Roundtable, South Lake Tahoe, CA, U.S.A., pp.195-204, October 1999

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、PDF ファイル（カラー版）がダウンロードできます。ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。