

Title	半導体製造における酸化・拡散工程のシミュレーションに関する研究
Author(s)	内田, 哲也
Citation	大阪大学, 2001, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/42307
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉 大阪大学の博士論文について 〈/a〉 をご参照ください。

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

氏名	内田 哲也
博士の専攻分野の名称	博士(工学)
学位記番号	第 16236 号
学位授与年月日	平成13年3月23日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 工学研究科電子工学専攻
学位論文名	半導体製造における酸化・拡散工程のシミュレーションに関する研究
論文審査委員	(主査) 教授 濱口 智尋 (副査) 教授 尾浦憲治郎 教授 西原 浩 教授 吉野 勝美 教授 森田 清三 教授 谷口 研二

論文内容の要旨

本論文はシリコン半導体デバイスの製造工程における酸化・拡散工程のシミュレーションに関する研究の成果をまとめたものであり、四章から構成される。

第一章はシリコンの熱酸化工程で発生する応力のシミュレーションについて述べたものであり、まず半導体デバイスの製造工程において発生する応力の評価の重要性を指摘すると同時に粘弾性応力計算における数値的不安定性の問題を指摘して本研究の目的と意義を明確にした後、シリコンの熱酸化過程についてこれまでに得られている物理的な知見をまとめている。続いて Deal-Grove の一次元酸化モデルを二・三次元に拡張して酸化速度を求め、有限要素法を用いて粘弾性応力解析を行う酸化シミュレーションの一般的手順についてまとめた後、Zienkiewicz の手法および Peng の方法という二種類の手法を用いて粘弾性問題の定式化が行われている。続く第六節および第七節ではプログラム化の段階で必要となる数値積分による行列要素の組み立て方法や境界条件処理の方法が説明されている。さらに第八節および第九節では先の二種類の定式化方法に従って二次元のテストプログラムが作成されその安定性が評価されており、Zienkiewicz のスキームを用いた場合には接線係数法を用いた離散化によって安定性が向上することを示され、さらに Peng のスキームを用いた離散化によってその安定性が一層向上することが示されている。そしてこの章の最後において、先の定式化方法を汎用の二次元および三次元プロセスシミュレータに適用し、実際の半導体製造工程において発生する応力を解析した事例が示されている。

第二章は熱処理工程における不純物拡散のシミュレーションについて述べたものである。まず半導体製造における不純物分布の予測の重要性を指摘して本研究の目的を明らかにした後、これまでに得られている知見として、ドーパント不純物の拡散に関する基本的なモデルと、不純物と点欠陥のペア形成反応に局所熱平衡を仮定した不純物拡散の定式化方法および実験で観察される種々の物理現象がまとめられている。続く節においては、ドーパント不純物の分布を正確に予測するための物理パラメータセットを得ることを目的として、文献発表された複数の点欠陥パラメータセットによるシミュレーションの結果を広範囲のプロセス条件に対して測定された実測プロファイルと比較することによって、デバイス特性の予測に最適なパラメータセットが選定されている。第七節では不純物拡散の数値計算手法が Kump のモデルを例として説明され、テストプログラムによる計算結果が示されている。第八節では低温での不純物拡散の時間依存性を決定する格子間シリコンのクラスタリング現象がシミュレーションされ、実測した不純物分布との比較からクラスタリング反応のパラメータが抽出されている。そして最後の第九節では、MOS トランジスタ

製造工程中のゲート酸化工程における不純物の再分布がシミュレーションされ、実測された不純物分布との比較により低温熱酸化における酸化増速拡散のパラメータが抽出されている。

第三章は半導体デバイスを構成する材料の熱膨張率の差および膜堆積中に生じた真性応力に起因して発生する応力のシミュレーションに関するものである。まずこれらの応力の発生機構を簡単にまとめた後、等価節点力を用いてこれらの応力を解析する手法が説明され、第三節ではトレンチ分離周辺における応力の解析結果が示されている。また第四節においては、シリコン単結晶の面方位によるヤング率の違いを考慮した応力解析の手法とそれを用いた解析例が示されている。

第四章はプロセスシミュレータの精度向上を目的とした SIMS データベースのデータ構造に関するものであり、今日のプロセスシミュレーションにおいて SIMS データベースが果たす役割の重要性を指摘して本研究の意義を示した後、SIMS データを管理するために新たに考案されたデータ構造が説明され、このデータ構造を用いて構築されたデータベースシステムが示されている。

論文審査の結果の要旨

本論文では、粘性係数に応力依存性を含んだ粘弾性問題を二種類の方法によって定式化し、二次元のテストプログラムを作成してこれらの手法の安定性が評価されている。酸化工程で発生する応力のシミュレーションでは安定性の向上は重要な課題であり、本研究の内容は実用的な半導体製造プロセスのシミュレータを構築する上で重要な役割を果たすものと考えられる。

本論文の成果を要約すると以下の通りである。

- (1) Zienkiewicz のスキームにより定式化を行う場合には接線係数法を用いることで安定性が向上し、粘性係数に応力依存性を考慮した計算が可能になることが示されている。
- (2) Peng のスキームを用いた粘弾性問題の定式化方法が完全な形で提示されている。
- (3) Peng のスキームによる定式化を用いることによって、Zienkiewicz のスキームを用いた場合以上に安定性を向上できることが示されている。
- (4) 上記二種類の手法による応力計算を二次元および三次元の汎用プロセスシミュレータに適用して、これらの方法が実用的な方法であることが実証されている。

また、本論文では点欠陥と不純物のペア形成反応に局所熱平衡を仮定したモデルによる不純物拡散のシミュレーションの結果を種々のプロセス条件の下で測定した不純物分布と比較することにより、以下のような成果が得られている。

- (5) 文献発表された点欠陥パラメータセットを一般的な局所熱平衡モデルと組み合わせて用いる場合には、格子間シリコンの拡散係数と熱平衡濃度の積の活性化エネルギーを 4.8eV とするパラメータが広い温度範囲で良い結果を与えることが追確認されている。
- (6) 炉挿入および引き抜きだけを行った試料の不純物分布より、低ドーズ量 ($\sim 10^{13}\text{cm}^{-2}$) のイオン注入の場合には、過渡的増速拡散がそれまで考えられていたよりも短い時間で終了していることが明らかにされ、さらに格子間シリコンのクラスタリングパラメータが抽出されている。
- (7) 同じ熱サイクルを持つゲート酸化工程と窒素アニールを行った試料の不純物分布を比較することにより、低温 (820°C) の熱酸化での酸化増速拡散のパラメータが較正され、一般的なゲート酸化条件においては不純物の再分布の大部分が注入損傷に起因した過渡的増速拡散によるものであることが明らかにされている。

以上のように、本論文は半導体製造における酸化・拡散工程のシミュレーションに関する新しい知見を含んでおり、電子工学の発展に寄与するところが大きい。よって本論文は、博士論文として価値あるものと認める。