

Si 表面への低エネルギーボロン注入に関する量子分子動力的検討

○佐川藍¹、伊賀英樹¹、篠田克己¹、古山通久¹、久保百司^{1, 2}、
 藪原秀彦³、加納正明³、今村詮⁴、宮本明^{1, 5}

¹ 東北大学大学院工学研究科 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 07)

² 科学技術振興機構さきがけ (〒332-0012 埼玉県川口市本町 4-1-8)

³ 株式会社 東芝 生産技術センター (〒235-0017 横浜市磯子区新磯子町 33)

⁴ 広島国際学院大学工学部 (〒739-0321 広島市安芸区中野 6-20-1)

⁵ 東北大学未来科学技術共同研究センター (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 10)

【緒言】

微細化の進む現在の半導体製造工程においては、原子スケールでの制御技術が重要となってきた。本研究では、低エネルギーボロン注入プロセスの表面現象に関して、量子分子動力的手法を用い、ボロンと周囲のシリコン原子のダイナミクスを統計的に解析した。

【方法】基板表面として、水素終端したSi (001) 2 × 1 面を用いた。シリコン (001) 面に垂直な方向を 0° とした入射角、(100) 方向を 0° とした回転角を変化させ、100eV の運動エネルギーをボロン原子に与え、当研究室で開発した高速化量子分子力学プログラム “Colors” を用いて照射シミュレーションを行った。

【結果】図 1 は、ボロン原子の到達深さ分布を示している。図 1a は回転角を 0° とし、入射角を変化させた結果、図 1b は回転角を 45° とし、入射角を変化させた結果を表す。実際の製造工程で用いられている 7° の入射角度において最も到達深さ分布が小さくなるという結果が得られた。

また、いずれの入射角度においても回転角度 0° から 45° にすると、平均到達深さが浅くなるのが分かった。図 2 に、照射シミュレーション中のボロン原子の運動エネルギーの変化及びボロン - シリコン間の Bond population の総和の変化を示す。シミュレーションの初期において、B-Si の共有結合性が強くなる度に運動エネルギーが大きく減少していくことが理論的に明らかになった。

このように、開発した高速化量子分子力学法により、入射角度依存性や、系のダイナミクスの統計的な解析が可能となった。

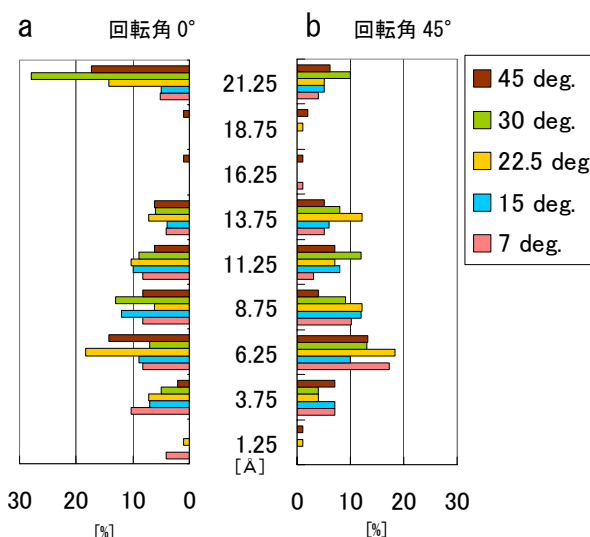


図 1 B 原子の到達深さ分布の入射角度依存

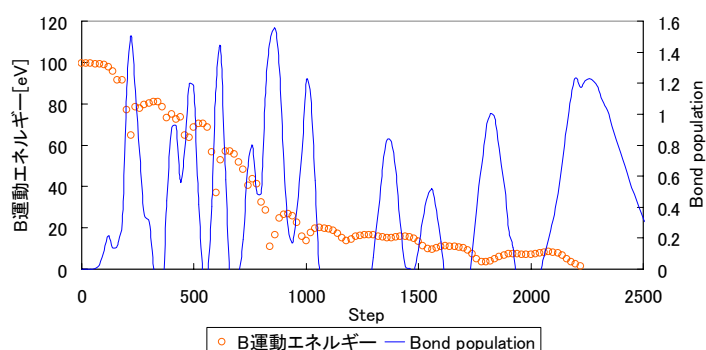


図 2 Si-B 間 Bond population の経時変化