

Tight-Binding 量子化学計算およびキネティックモンテカルロ法

を用いたマルチスケール酸化膜絶縁信頼性予測シミュレーション

坪井秀行¹、稲葉賢二¹、林由紀江¹、三浦 隆治¹、鈴木 愛²、
遠藤 明¹、畠山 望¹、高羽洋充¹、久保百司¹、宮本 明^{1,2}

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 6-6)

²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 6-6-10)

【緒言】超 LSI の微細化に伴い近年では、膜厚数十 nm のゲート酸化膜での絶縁信頼性が求められており、デバイス設計において原子レベルの量子化学的知見に基づいた電圧-電流特性推算シミュレーションによる信頼性予測は重要な設計指針を与えるものと期待される。本研究では、原子レベルでの量子化学計算により求められたシリコン酸化膜の電子状態データに基づいて Time Dependent Dielectric Breakdown(Tddb)特性を再現する新規シミュレータを開発したので報告する。

【計算方法】酸化膜の電子状態計算には当研究室で開発した Tight-binding 量子化学計算プログラム "Colors" を用いた。また酸化膜の電圧-電流特性を推算するデバイスシミュレーションには、同じく当研究室で開発した新規シミュレータを用いた。

【結果】まず酸化膜-多結晶シリコン界面での電子状態計算結果の一例として、高温クリスタライト型 SiO₂(100) と Si(100)界面の計算モデルおよび算出された部分状態密度を Fig.1 に示す。同図から分かるとおり、界面層ではバンドギャップは観察されないが界面から離れるに従いギャップが形成されている様子が観察された。次に定電流ストレスを与えた場合の Tddb 特性計算結果を Fig. 2 に示す。電圧-電流特性デバイスシミュレータでは、電子および正孔トラップの位置を仮定し、トラップ間の移動確率は Fowler-Nordheim トンネル確率に従うものとした。図からストレス後の電圧効果はストレス前の約 3%であり、これは実測値 1.4%と概ね一致する結果であった。これは、インパクトイオン化による正孔トラップの生成により引き起こされたものと考えられる。

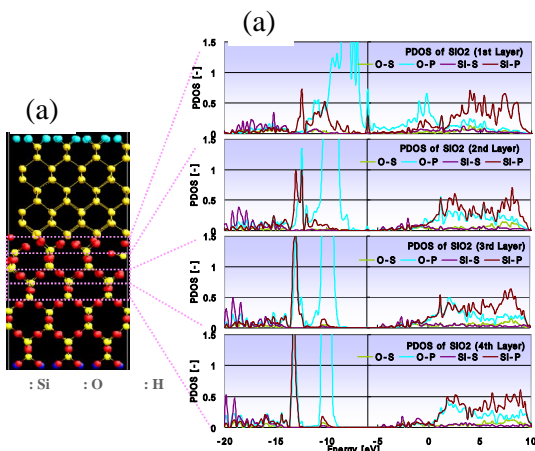


Fig. 1 酸化膜-多結晶シリコン界面の(a)計算モデルおよび(b)量子計算により求めた部分状態密度

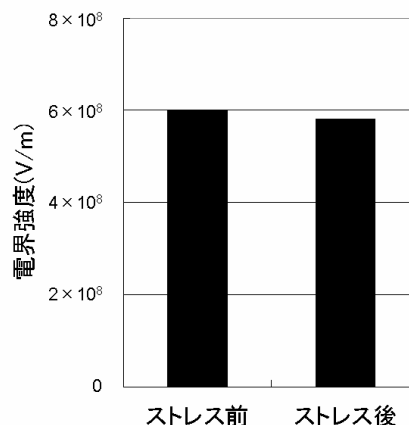


Fig. 2 定電流ストレスを与えた場合の Tddb 特性計算結果