

# シリコン集積回路における応力起因の転位

IBM.J.Res.Develop.Vol.36 No.2 March 1992,p158

訳 (RDC)[EM3] 泉 聡志 Nov.1997

*abstract* シリコン集積回路の製造工程プロセスにおいて機械的応力が発生する。十分大きな応力下においては基板は転位を生成する。我々は応力起因転位の生成について調べている。例えば、研究開発中であるバイポーラやMOS集積回路構造が挙げられる。酸化起因応力の基礎的な原因や酸化工程による違いについて議論する。ここで得られた知識はSTI生成時の転位発生の説明に使われる。転位発生におけるイオンインプラプロセスの重要性をディープトレンチ分離プロセスやDRAMセルのトレンチキャパシタ製造プロセスの構造を用いて示す。素子のレイアウトによる転位生成の効果についても触れる。また、TEMによる観察によって、転位を発生させるプロセス状態をただ見つけだけでなく、より多くの情報を得ることが出来ることを示す。TEM観察と応力解析を組み合わせることによって、転位を移動させる応力源を同定できる方法を示す。

## 1 序章

高応力によって生じる転位は電荷のリーク、電氣的ショートを引き起こしデバイスにとって致命的である。

IC製造工程における応力発生源には様々なものがある。いくつかの重要な例は、熱膨張率が異なる物質の埋め込み、真性応力を持つ膜のデポ、平面でない表面の酸化などである。最近のHu[3]の論文によってこれらの応力問題については見事にまとめられている。本論文では最新のバイポーラ、MOS集積回路製造における応力起因の転位生成の例を示す。最近の集積回路においては、チップあたりの回路の実装密度が増加し、素子の大きさが小さくなる傾向がある。しかし、残念ながらこの二つの傾向はプロセスの応力レベルを増加させる方向にある。

高密度実装においては、素子間の距離が小さくなるため、素子間分離による絶縁が必要になる。一般に素子間分離に必要な面積の減少は基板に大きな応力をもたらす。さらに、素子領域の減少は、素子が素子分離領域に接近することになるため、その領域には大きな応力が負荷されることになる。素子のサイズは間接的にも基板の応力を増加させる。素子の大きさを小さくするためには、ドーパントの拡散制御が必要である。これには低温化が有効な手段である。しかし、酸化工程においては低温化は高応力を生み出してしまふ。これは、低温化に伴って、酸化膜が硬くなるためである。よって低温化が進むにつれ、酸化工程の重要性は大きくなるであろう。

応力は転位の発生の原因となるのだが、一体どの程度の応力まで基板は耐え得るのであろうか？この問題に関して単純な答えはない。多くの研究の中では $10^6$ [Pa]か、それ以上と考えられているが、シリコンウェーハの強度は多くの他の要素に依存する（一特に酸素、熱履歴）。また、応力起因の転位は2つのステップがある。最初に転位は生成され、それから、成長、移動し、素子に影響を及ぼす。転位を生成するのに必要な応力は生成の過程に大きく依存する。生成核はas-grownウェーハにあるか、もしくはプロセス中に導入される。転位生成をアシストするよくあるプロセスは、酸化とインプラである。酸化は格子間シリコンを生成し、それらはひずみを持ったシリコン中で選択的に凝集できる。Vanhellemontは格子間シリコンの凝縮による転位の均一生成について詳細に述べている。イオンインプラは格子構造を壊し、過剰な点欠陥を作る。インプラによって起こる転位生成の詳細はわかっていないが、インプラのダメージによって転位が生成されることはわかっている。これらの例は4,5章に述べる。一度転位が生成されると、それらは負荷されている応力によるすべりによって大きく移動する（転位の移動度は生成と同様、酸素や熱履歴に依存する）。よって、最初はある部分の局所的な応力で作られた転位も、素子の他の領域に広がるができる。

論文中の例は開発中のICプロセスに使われている構造からとった。応力の基礎となるケースを例示し、どのように転位が発生し、どのように解決されるかを示した。

## 2章 酸化起因応力（温度、圧力、雰囲気依存性）

## 3章 低温化による欠陥発生の例として、STIプロセスを挙げる。加えて、レイアウト依存性について述べる。

#### 4章 インプラによる欠陥生成プロセスについて

#### 5章 転位発生の応力解析の詳細

## 2 酸化起因応力

酸化はシリコン基板に2種類の方法で応力を導入する。一つはSiO<sub>2</sub>の体積膨張である。2.2倍程度に膨張する。もし、酸化膜が自由に膨張できないのなら、その成長を拘束している物質を押すことになる。これはIC製造工程においてよくあり、例えばPolySiで埋め込まれたトレンチのサイドウォールに沿った酸化や、Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>でマスクされたエッジ部分の酸化がある。二つ目は平面でない構造の酸化の際のひずみである。平面でない酸化においては、酸化膜は引っ張られたり収縮されられたりする。

どの程度の応力が酸化膜からシリコンへ伝わるかは、酸化膜が成長過程においてどの程度変形しやすいかによって決まる。以下の章には平面でない基板上を成長する酸化膜の変形を考える。特に、酸化膜の応力の酸化反応への影響について考察する。

### 2.1 SiO<sub>2</sub>の成長

酸化においては、Si/SiO<sub>2</sub>界面の酸化膜の成長は酸化膜をSi表面から上に押し上げる。凸状の表面上では、酸化膜は接線方向の引張応力を受け、凹状の表面上では圧縮応力を受ける。我々の興味は、酸化工程においてどのように応力が生じるかである。これには、最も重要なこととして、成長時に生じる応力による酸化膜の変形に対する理解が必要である。これに関する我々の知識は十分とは言えず、研究課題である。しかしながら、ここ数年の研究においては、SiO<sub>2</sub>を非線形粘弾性体とみなすことで一致している[13,14]。Rafferty, Hu[13,15]がSiO<sub>2</sub>の粘弾性的性質の優れた実証を出している。彼らは、シリコンの円柱の酸化という単純なモデルを考えている。この問題は、単純であるが酸化起因応力の本質的な特徴を引き出している。Huは色々なプロセス条件下の酸化応力をモデル化した。RaffertyはHuよりも限られた条件下でモデル化を行っているが、より現実的なモデルになっている。以下の取り扱いはRaffertyのモデルを用い、Huのモデルの予測を色々なプロセス条件下で再調査する。モデルの調査として酸化される円柱のモデルを用いる。

表面に薄い酸化膜を持つ円柱の断面を考える。酸化膜の外周は半径 $r_0$ である。円柱が酸化されたとき、新しく形成された酸化膜はももとの酸化膜を押し上げる。ある酸化時間で最外周の半径が $r_0$ から $r$ へと伸びたとする。この過程において接線方向のひずみ $\varepsilon = (r - r_0)/r_0$ が必要になる。もし、酸化膜が $\dot{X}_{ox}$ の成長速度ならば、 $\dot{r} = (1 - \beta)\dot{X}_{ox}$ となる。 $\beta=0.44$ はある酸化膜の成長厚さに対するシリコンの消費量である。よって、最外周の酸化膜のひずみ速度は以下の式で表せる。

$$\dot{\varepsilon} = \frac{(1 - \beta)}{r_0} \dot{X}_{ox} \quad (1)$$

問題はどのようにこのひずみが成立するかである。もし酸化膜が変形に対して高い抵抗を持つなら、大きな応力が酸化膜中、結果シリコンにも生じるはずである。一方、酸化膜が簡単に引っ張られるなら、酸化中にほとんど応力は生じないはずである。一般に、応力は弾性変形と粘性流動の組み合わせによってつりあう。HuやRaffertyの扱いに従い、粘弾性変形プロセスをばねとダッシュポットの結合で表す。これはMaxwellモデルとして知られている。

初期状態では応力ゼロを考える。応力はばねの端を動かす力を与えることによって導入される。全ひずみは $\varepsilon = (A - A_0)/A_0$ である。もし、ばねの端が速度 $v$ で動くならば、系のひずみ速度は $\dot{\varepsilon} = v/A_0$ である。全ひずみは弾性変形と粘性変形の和になる $\varepsilon = \varepsilon_{elastic} + \varepsilon_{viscous}$ 。弾性ひずみは

$$\varepsilon_{elastic} = \frac{(A - B)}{A_0} = \frac{\sigma}{G} \quad (2)$$

Gはばね定数である、粘性流動の応力-ひずみ関係は

$$\varepsilon_{viscous} = \frac{\dot{B}}{A_0} = \frac{\sigma}{\eta} \quad (3)$$

$\eta$  はダッシュポットの粘性係数である。これより

$$\frac{\dot{\sigma}}{G} + \frac{\sigma}{\eta} = \dot{\epsilon} \quad (4)$$

式(4)は単純であるが、酸化の応力を決める多くの重要な要素の解釈に有用である。 $G, \eta$ をSiO<sub>2</sub>に相当する値を使い、式(1)の $\dot{\epsilon}$ を使うことによって、異なった酸化条件における相対的な応力レベルがわかる。例えば、ある温度における異なった厚さの酸化膜の相対的な応力や、異なった温度におけるある膜厚の酸化膜の応力などである。

最も単純なケースとし、成長レートと粘性係数が一定の場合を考える。この場合、式(4)は以下のように解かれる。

$$\sigma = \eta \dot{\epsilon} \left(1 - e^{-Gt/\eta}\right) \quad (5)$$

この式によると、酸化膜はゼロ応力から出発して漸近的に $\eta \dot{\epsilon}$ の値に近づく。物理的には、これは酸化膜は成長初期には弾性的に振る舞い、膜が成長するにつれ、粘性流動で緩和することを示す。定常状態では応力は酸化速度×粘性係数に比例する。明らかに、低い粘性係数は応力を低減させる。酸化膜の粘性係数は高温になるにつれ、また水酸基(-OH)が含まれるにつれ小さくなる。よって、出来る限り高温のwet雰囲気中で酸化するのが望ましい。しかしながら、酸化レートは温度とともに速くなり、wet雰囲気のほうがdry雰囲気よりも速い。速い酸化膜成長はひずみ速度を増加させ、応力蓄積を避けるように粘性流動が増加する。このような交換条件(trade-offs)は式(4)によって得られる。このことについては、式(5)は、高温のwet雰囲気で作られる酸化膜の応力が最小になることを予測している。Huは高圧スチーム酸化がさらに応力を低下させると予測している。

以上の解析は、粘性係数が成長中で一定と仮定して。また、SiO<sub>2</sub>を温度と水酸基の関数と考えている。しかしながら、実験的には粘性係数は高応力下では低下する。最近の酸化起因応力の扱いはこの点の考慮を試みている。Sutarjda[19,20], Rafferty[13], Stiffer[14]はEyringモデル[21]を使っている。Eyringモデルでは粘性係数は高応力ではかなり低くなる。以下の式で表される。

$$\eta = \eta_0 \frac{(\sigma V_m / 2kT)}{\sinh(\sigma V_m / 2kT)} \quad (6)$$

$\eta_0$ はゼロ応力の粘性係数、 $V_m$ は活性体積である。Eyringは粘性係数の応力依存性を絶対反応速度論の見地から解析した。しかしながら、原子的なアプローチによる定量的予測は実験にはよく一致しなかった[16]。一致させる為に $V_m$ をフィッティングパラメータとした。Donnadieu[18]らは約 $180 \text{ \AA}^3$ を得ている。

酸化応力がプロセス変化によりどう変わるかをfig.2に示す。これは $1 \mu\text{m}$ 半径の円柱のシリコンの酸化である。この図の作成には、式(4)を式(6)で与えられる粘性係数を用いて求めた。 $G=3 \times 10^{10} \text{ [MPa]}$ を用い、粘性係数はStiffer[14]の値を用いた。酸化レートはDeal-Groveの式を[24]仮定した。

$$\frac{X_{\text{Ox}}^2}{k_p} + \frac{X_{\text{Ox}}}{k_l} = t \quad (7)$$

$k_p, k_l$ は放物線状成長レート定数と、線形成長レート定数である。wet酸化はRazouk[25]の値、dry酸化はHess, Deal[26,27]の値を用いた。

Fig.2(a)には異なる温度下での応力の膜厚依存性を示す。温度が上がる程に応力は低下する。これは粘性係数が低下するからである。Huの値は、応力非依存の粘性流体モデルを使っているので、Fig.2(a)よりさらに温度依存が大きい。2番目の効果は高温程、線形成長レートから放物線成長レートへの遷移が早くなることによる。粘性流動下においては、応力はひずみ速度の減少にともない小さくなると考えられる。よって、放物線状成長中においては酸化速度が減少するにつれて、応力も減少する。その効果は $1100 \text{ }^\circ\text{C}$ で最も強調されている。Raffertyによる結果はこのような傾向はみられない。それは単純化のため放物線領域を無視しているからである。応力はピーク値を持つが、この応力で転位が生じなければ、どの厚さの酸化膜でも形成可能であるということになる。厚い酸化膜はこれ以上大きな応力が生じないであろうが、薄い酸化膜においてはその保証はない。それを支援する実験結果が3章に示される。

Fig.2(b) は酸化雰囲気による効果を示す。圧力の効果は考慮するため、 $k_p, k_i$  を圧力に線形にスケールした。dry から wet 酸化への応力低下と、常圧から高圧酸化への応力低下は粘性係数の低下にともなうものである。高圧ウェット酸化の応力低減は常圧に比べ非常に大きい。

5-atm 酸化において、応力に弾性の寄与が大きくない、つまり、1-atm のドライ酸化やウェット酸化ではあるような、薄い酸化膜厚における初期の応力増加が見られない。これは粘性係数が常に低いことによる。しかし、これは予想だけである。実験では、それほど応力緩和しないというデータもある。

また、酸化種の分圧を減らす効果についての計算を行った。粘性係数は変わらず、反応レートのみが小さくなる。よって、応力は小さくなるはずである。0.1atm の dry 酸化は 1atm の wet 酸化とほぼ一致する。(0.1atm の結果は 1atm の wet と一致するのでプロットしていない) この希釈酸化の欠点は酸化時間が長く、許容出来る熱供給を越えてしまうことである。wet 酸化の希釈酸化は全く異なる結果になる。希釈により酸化膜の成長レートが小さくなるが、酸化膜の粘性も小さくなってしまう。0.1atm の wet 酸化は 1atm の dry 酸化と一致する。圧力を低下させると応力が増加してしまうのである。この二つの例より、最も悪い条件は高圧力、dry 酸化であることがわかる。dry 酸化の圧力の増加は酸化レートを増加させるが、粘性係数は低下しないため高応力となる。

## 2.2 Si の応力の定量的なモデル化

前の議論で SiO<sub>2</sub> 中の残留応力を決める基本的な要素について要約したものである。我々が本当に興味があるのは任意の形状に酸化されたシリコン基板の応力分布である。単純に式 (4) を解くよりも、問題のモデル化がかなり必要となる。原則的に、適当なプロセスモデルを使ったコンピュータシミュレーションは、なんらかの現実的な状況の応力分布の計算に使われる。本論文では、応力評価を単純な解析の近似に頼る。我々が選んだ応力発生の例は、そういった取り扱いに役立ち、正確なプロセスシミュレーションからの答えより理解し易い。ここで、プロセスシミュレーションのアプローチについての短いレビューを入れる。酸化モデルの必要性を理解することは、酸化と応力の蓄積を制御する物理的なプロセスへの、さらなる洞察を与える。また、酸化モデルの現状と、酸化起因応力のモデル化への利用についての要約について述べる。

プロセスシミュレータは数値計算手法等の違いはあれ、アルゴリズムはだいたい同じである。フローチャートを fig.3 に示す。これは我々のプロセスシミュレータ FEDSS(Finite Element Diffusion Simulation System[28]) で使われているアルゴリズムである。ある時間内での SiO<sub>2</sub> 中の酸素の拡散をシミュレートする。これがシリコン表面への酸素の流束を決め、Deal-Grove 式より反応レートが決まる。ひずみ速度はそれぞれの要素について純粋な粘性流体モデルを使って求められる。Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> も粘性流体として扱われる—これは Griffin, Rafferty[29] の仕事によって支持されている。Si/SiO<sub>2</sub> の界面の応力—ひずみは境界値問題として取り扱われ、シリコン側の値は弾塑性モデルを使って決められる。このプロセスは次の時間ステップへと繰り返される。

このプロセスモデルのプログラムの欠点は、酸化を三次元でシミュレーションしないところである。よって、シミュレーション結果のの妥当性は、二次元で切った平面解析近似で良いかどうかにも依存する。我々は、本論文においても、何度となく応力の三次元的性質を明確に示唆する。本モデルの三次元への拡張は難しいが解決できない問題ではない。IC の構造における三次元モデルの必要性が増し、コンピュータの計算能力の進歩によって計算経費が縮小されることにより、適切なプログラムが開発により勢いがつくことは間違いない。

二次元であろうと三次元であろうと、酸化膜の応力の正しいモデル化は、その酸化プロセスへの影響のため、かなり重要で必要である。酸化応力の酸化レートへの影響は実験的に多くの研究がなされている。Marcus[31] は最初に酸化成長が凹凸の形の表面で遅れることをしめした。転位が生成されなくとも、このような酸化膜の薄膜化(シンニング)は高電界集中のために信頼性の問題になることが知られている。色々な形の酸化膜成長は Kao [34-36] らによって研究された。Sheung[37] は酸化膜分離領域の端近くで酸化が遅れることを示した。

この酸化が遅れる減少は、応力効果が支配的であると信じられている。凹凸コーナにおける酸化レートの遅れ方はこの考え方と一致する。例えば、Yamabe[33] はトレンチコーナの酸化は、低温より高温の方が、

dry 酸化より wet 酸化の方、常圧の dry 酸化より希釈 dry 酸化の方が遅れないことを示した。これは高い酸化膜の応力がコーナのシンニングを引き起こしていることを示す。最近の Imai[38] らの結果によりシンニングが少量の NF<sub>3</sub> の添加により軽減されることがわかっている。NF<sub>3</sub> は酸化レートを上げるので、これは NF<sub>3</sub> が粘性係数を低くすることを示している。Kouvatsos[39] らの実験によってこの効果は確認されているが、平面酸化による真性応力と、非平面の酸化による応力との関連については多少の疑問が残る。

最新の実験結果から、コーナ酸化のシンニングの程度は酸化膜中の応力の量で決まることが見えてくる。我々は最近、高圧力スチーム酸化の酸化応力への影響を調査するため角部酸化の実験を行った。800 °C 10atm の wet 酸化は常圧での wet 酸化より酸化レートの遅延が大きい。これは Hu モデルと食い違う。我々の結果は、高圧力下ではどんなに酸化膜の粘性係数の低下が起こっても、増加した反応レートによる酸化から起こる高応力は相殺できないことを示している。

応力効果はフィールド酸化のシンニング源ともなる。1μm より小さい酸化窓の LOCOS プロセスにおいて、酸化の遅延が見られた。これは酸化種の拡散律則の減少であるとされたが、最近の研究 Lutze[41] で応力効果であることがわかっている。

酸化のモデル化のためには、どのように応力が酸化に影響しているかを理解しなくてはならない。Fig.3 のフローチャートより、もし応力が酸化種の拡散係数や表面反応レートに影響を及ぼすなら、酸化が応力の影響を受けることがわかる。応力はまた、SiO<sub>2</sub> 中の酸化種の固溶度にも影響する。この話題のわかりやすいレビューが Rafferty[42] によってなされている。彼の結論は以下の通りである。1) 酸化種の拡散係数は圧縮応力下で低下する。引張においては変わらない。2) 表面反応レートは表面に垂直な圧縮応力によって低下する。3) 酸化種の固溶度におけるデータは十分でない。酸化種の拡散係数の変化によって定性的に説明されているいくつかの結果のいくらかは、固溶度と拡散係数の両方の変化を反映しているかもしれない。

現在まで、プロセスシミュレーションのプログラムは Chin[43-45] らによって起工された仕事から続いている。これは粘弾性流れより粘性流体によるモデルを仮定している。酸化膜は非圧縮流体として取り扱われる。ばねとダッシュポットの系による類推においては、ばねを完全な剛体と扱うことに等しい。もし、弾性ひずみが無視できないなら、弾性変形しないため、このようなモデルは蓄積応力を過剰に見積もってしまう。この問題は、粘性係数を高応力において低下させない場合、つまり非線形粘性流体モデルより線形粘性流体モデルを仮定した場合、いっそう大きくなる。

粘性係数  $\eta$  が応力に依存すると仮定すると、非線形的挙動を粘弾性的取り扱いへ導ける。一定粘性係数モデルと異なり、応力依存はプロセス条件と応力レベルの定性的な関係には影響しない。しかし、定量的な結果に深く影響する。いくつかの例が Fig.4 に示される。これらは応力依存の粘性係数とひずみの弾性成分の貢献を分けて示している。粘性流体モデルでは、ひずみの弾性成分は無視している。線形モデルでは粘性係数は応力に依存しない。Fig.4(a) は 800 °C の wet 酸化の予測の比較である。線形粘性流体モデルでは  $G$  が無限大になり、 $\sigma = \eta_0 \dot{\epsilon}$  となり、式 (1) と (7) を用いて、

$$\dot{\epsilon} = \frac{1 - \beta}{2r_0} \frac{k_p}{(k_p/2k_l + X_{OX})} \quad (8)$$

応力依存は式 (6) により取り込まれる。Fig.4(a) より非線形粘性流体モデルは、線形粘性流体モデルよりかなり低い応力になる (40 倍程度)。弾性ひずみの影響が入ると応力は最初は膜厚によって増加し、粘性流体モデルへ漸近すると予想される。非線形粘弾性モデルの解が、たったの 80nm 成長後に非線形粘性流体モデルの解と一致するにもかかわらず、線形粘弾性モデルの解は 300nm の酸化膜成長後でも線形粘性流体モデルに併合されない。応力増大に伴って酸化膜は粘性係数が低くなるので、非線形粘性モデルのアプローチが予測する挙動は線形粘弾性モデルよりもより早く粘性流体の領域に近づくのである。Fig4(b) は 1000 °C の wet 雰囲気での予測を示したものである。定性的に、結果は Fig4(a) と一致するが、モデル間の一致は 1000 °C のほうが顕著である。この一致は酸化膜の粘性係数が低くなった結果である。ある与えられた酸化膜厚さでは、粘性が低いほど、発生する応力も低い。これによって、応力に依存した粘性係数を含む効果が最小になり、非線形と線形粘性流体モデルが互いに近づくことになる。酸化膜の粘性が小さくなるにつれ、弾性の効果は重要でなくなり、酸化初期を除いては、非線形粘弾性モデルと、非線形粘性流体モデルの予測は一致する。1100 °C では、酸化膜の粘性係数が特に減少するため、予測の違いはほとんど区別できな

い。Fig.2(b)<sup>1</sup>に示した 5atm の 900 °C酸化については、双方のモデルで同じ応力予測が導かれる程、酸化膜の粘性係数は十分に低い。

基本的に、酸化膜に大きな応力が発生しなければ、酸化膜の変形モデルの選択は重要ではない。しかしながら、酸化レートに影響する程度に応力が大きい場合はモデルの選定が重大になってくる。非圧縮流体の仮定が単純であるにもかかわらず、応力依存の粘性係数の仮定から大きな誤差が生じる。応力依存の粘性係数を使った場合は、非圧縮性流体モデルと粘弾性モデルの一致はかなよくなる。応力依存の粘性係数モデルは、FEDSS のプログラムに加えられる予定である。また、既に、現在の Stanford の SUPREM4、Berkeley の CREEP、IBM の NOVEL には組み込まれている。

幸運なことに、新たな酸化起因応力シミュレーションの必要性は、酸化モデルの現在の開発によくリンクする。酸化モデルの開発の到着地点は非平面構造上に成長する酸化膜の形状の正確な予測である。この仕事では酸化膜の形を決める重要な要素の一つとして応力を扱う。この事情により、より良好な酸化モデルの開発が、より良い応力モデルにつながることになるであろう。

古い酸化モデルに比べ、現在のモデルの予測は、低温での酸化起因応力に限れば、より、楽観的な予測がなされる。IC プロセスが向かう 800 °Cから 900 °Cの温度域では、新しい応力依存の粘性モデルは、一定粘性係数のモデルより、時折、何桁か低い応力を出す。もし、一定粘性係数のモデルが正しければ、基板に大規模な欠陥生成や酸化膜のわれなどが問題になっているはずである。これが起こっていないことは、明らかに応力の存在が粘性係数を低下させ、基板に転位を生成しないで、酸化膜が粘性流動によって応力を軽減させていることを示している。3章では、850 °Cの低温酸化を使って作った無転位の素子分離構造の例を示す。応力非依存の SiO<sub>2</sub> の粘性係数を使うと、このような低温で酸化分離工程を無転位で行うことは不可能であると予測できる。3章では、この章で議論した考えをもとに、プロセス条件が転位の発生に及ぼす影響を例示する。

### 3 Shallow-trench isolation

応力起因の欠陥の最初の例として、STI として知られる先進型素子分離プロセスにおける転位の発生を試験する。伝統的に、集積回路密度の増加は単純にフォトリソグラフィのスケールによって成されてきた。しかしながら、先進型のリソグラフィはいくつかの材料関連の限界にさらされている。それらの一つが伝統的な凹所 (recess) 酸化膜や、semi-recess 酸化膜の素子分離のスケールに関する問題である。酸化膜の側方酸化や粘弾性変形の結果、一般的にかなりの”bird’s beaking”が生じ、それはリソグラフィで描かれた形よりかなり大きくなってしまう。この効果を最小にするためには、パッドの構造の改善がいくつかの方法で行われてきた。しかしながら、この方法を使って素子分離のゆがみ (bias) の量を小さくできる間は、無視できない問題である。一般に、このような素子分離の計画として、bird’s beaking を縮めるプロセスの変更は、プロセス起因の転位生成の発生度を増大させてしまう。

代替素子分離技術である STI が開発されてきた。これは、これまでの凹型酸化手法よりも横方向のゆがみ (bias) を小さくしようという試みである。このプロセスでは、分離の形をフォトリソグラフィにより形成し、比較的浅いトレンチを RIE によって形成する。RIE のダメージを軽減させ、トレンチ表面を電氣的に保護するために薄い酸化膜を成長させる。次に厚い SiO<sub>2</sub> を CVD によってデポし、完全にトレンチを埋め込む。その後構造は平坦化される。構造を Fig.5 に示す。平坦化後、wet 化学エッチングレートを熱酸化膜の値と同等にするように、比較的高温でアニールを行なう。RIE がほぼ垂直な側壁を形成できるため、形のゆがみはほとんどゼロであり、素子分離プロセスは真に scalable(形を保ったまま大きさを変えることができる) である。STI プロセスはスケーラブルで、拡張性の面から有効であるが、トレンチ構造はプロセス起因の転位生成の発生度が大きいとも示されている。

平坦化後の STI 構造ではシリコン基板には、ほんの少しの応力しか発生していない。トレンチを満たす酸化膜の粘弾性挙動のため、平坦後のアニール温度では本来応力はゼロと予測される。構造を冷却するにつれ、SiO<sub>2</sub> と Si の線膨張率差による熱応力が生じる。経験的に、単に熱収縮によって生じる応力はたいしたものではない。しかしながら、デバイス製造において必要な、STI 平坦化後の熱酸化中の高温時におい

<sup>1</sup>文献の誤植

て大きな応力が生じる得る。このプロセスは Fig.5 の断面図から容易に想像できる。基板の表面酸化において、酸化はトレンチ表面でも生じる。酸化レートは基板表面に近いほど速い。Si の熱酸化によって大きな体積膨張が生じるため、トレンチ側壁の酸化は、トレンチへくさびの打ち込んだ後、トレンチを埋め込み、近接のシリコンの応力を作用させる工程に類似している。このくさびによる応力生成の正確な性質は、部分的には、温度依存の酸化のカイネティクスによって決まる。Si と SiO<sub>2</sub> の線膨張率差により、酸化温度での応力は冷却時にはさらに増加する。

欠陥生成における酸化の効果は2つの異なる STI パターンについて研究されている。これらのパターンを Fig.6 に示す。今後の議論においてパターン (a),(b) をそれぞれタイプ A,B と呼ぶことにする。これらの素子分離パターンは 16Mb の DRAM プロセス向きである。(この CELL 構造は併合 (Merged) 分離、NODE トレンチ (MINT) を使っている。) 両パターンは同面積である。0.7 $\mu$ m ルールを実現する場合、セル面積は約 7 $\mu$ m<sup>2</sup>、これは Fig.6(b) の破線の囲みで囲まれた領域で示される。デバイスを互いに分離し、トランスファードバイスと蓄電キャパシタを接続する方法をいろいろ調べるためにパターン A,B のレイアウトが作られた。パターン A と B の相対的な欠陥の発生頻度についての調査も行なわれた。

STI 構造の欠陥生成の発生度を決定するために、酸化ステップの条件振りを行ない、欠陥は TEM 解析により観察した。サンプルはウェット O<sub>2</sub> 雰囲気、温度 850、950、1050 °C で、デバイス製造に必要な異なる厚さの酸化膜を作る。同じチップ内で2つのセルタイプの欠陥構造の比較を直接行なえる。これによりウェーハ間の、ウェーハ内の違いを除去できる。平面 TEM は欠陥構造の観察に使われる。それぞれの実験において数百のセルを観察した。

欠陥生成の発生度は次の方法によって決めた。ある温度で、サンプルは異なる時間の酸化を行ない、200nm 厚さまでの酸化膜を作った。200nm 以上は DRAM プロセスでは必要ではない。平面 TEM 解析は酸化プロセスによる応力がシリコン基板に欠陥生成を生む点の決定に使われた。ほとんどのケースでは、glissile 転位 (すべり転位) のみ観察されたが、低温酸化では積層欠陥もしばしば見られた。

Fig.7 に研究結果をまとめる。タイプ B のパターンでは、すべての温度において、200nm またはそれ以下の酸化を欠陥なしで行なえた。タイプ A のパターンはより欠陥が発生し易かった。1050 °C の酸化のみが欠陥なしで 200nm の酸化ができた。850 °C では 30nm の酸化のみがセル内に欠陥が発生することなく酸化が行なえた。応力がトレンチ側壁酸化から発生していると証明するために、トレンチ側壁の保護膜酸化の次に、酸化のバリア (SiN) をトレンチに挟み込んだ (デポ酸化膜でトレンチを埋め込む前)。この小さなプロセスの修正により、かなりの酸化が欠陥発生なしに行なえるようになった。これにより推定したメカニズムを確認した。この欠陥生成の劇的な性質を Fig.8 に示す。これは 850 °C のパターン A の酸化である。これらの顕微鏡写真は Fig.7 の左下のデータ点にあたり、些細な酸化膜厚の増加による、マイクロ構造の大きな劣化が見られる。

結果の要約として、欠陥のない素子分離構造の開発の決定的な要素は、トレンチの形状と酸化温度の両方であることが明らかになった。全章の議論と一致して、酸化温度が低くなるにつれ、応力の蓄積が重要となってくる。前章では、この傾向は酸化膜の粘弾性の性質でほとんど説明された。温度の低下に伴ない粘性係数は増加し、それに付随した粘性流動による応力緩和の減少によって、同じ酸化膜を成長させた場合でも、より大きな応力を作り出してしまうことになる。その他の重要な要素は、面方位の酸化速度への依存性である。異なる面方位の表面の酸化速度は {111} > {110} > {100} の順で増加することが知られている。ウェーハの表面は {100} 面に沿っているが、トレンチ側壁は {110} 面の沿っている。この2つの表面の酸化速度の違いは埋め込んでいないトレンチの酸化で見られる。200nm 厚さの酸化膜を成長させた場合、{110} 面の平均酸化速度は {100} 面より、1050 °C で 17 %、850 °C で 39 % 程度速い。それゆえウェーハ表面に比べ、トレンチ側壁ではより酸化が起り、より多くの応力が発生すると予想される。この二つの要素—シリコンの酸化速度の面方位依存性と酸化膜の粘弾性挙動—の両方が特定の素子分離パターンにおける酸化起因欠陥発生の温度に依存した耐力を決めている。

観察されたパターン依存性をさらに詳細に見ると、ある単純なモデルの概念が得られる。それは酸化膜で埋め込まれたトレンチの酸化による一次元の応力進展である。Stiffer は Fig.5 に示したような STI パターンの断面を考えることによって、このアプローチを行なった。形態の幾何学的形状はトレンチの幅  $W_t$  とシリコンのメサの幅  $W_m$  の項で定義される。側壁に沿って異なる厚さの酸化膜に対して、シリコンのメサのひ

ずみ量を表面で評価する。ばねとダッシュポットとの類似性が Fig.9 に示される。Fig.9 のくさびの挿入が側壁酸化プロセスを表す。酸化が進むにつれ、酸化膜のトレンチも、シリコンのメサも両方とも、成長する酸化膜層を調節するためにひずむ。酸化膜の粘性流動の取り扱いが 2 章に示したものと似ている。SiO<sub>2</sub> は式 (6) の Eyring の関係で表現できる応力依存の粘性係数を持った非線形粘弾性体として取り扱われる。解析の残りはここには示さない。読者はより詳細が知りたければ文献 [14] を参照されたい。

[14] の文献の主な結果の一つは、応力(ひずみ)が最初は酸化膜成長量に線形に増加し、その後、ある酸化膜厚さ(主として、酸化温度と構造の幾何学的形状で決まる)で飽和する。応力の挙動は定性的に Fig.2(a) に示された円柱酸化の例と同じであり、基本的には 2 章で示されているものと同じ説明ができる。もし、飽和応力(最大応力)が転位発生に関する臨界量以下になるように形状と酸化条件を選ぶと、シリコンにダメージを及ぼすことなしに、比較的厚い酸化膜を成長させることができる。これは Fig.7. のデータのパターン B の条件に現れている。もし、反対に、応力飽和のレベルが転位発生の臨界応力を超えれば、ある温度のある膜厚以下の酸化膜のみしか欠陥の発生なしでは成長させられない。これは Fig.7 のデータのパターン A の条件に現われている。

2 章に議論されているように、飽和応力のレベルは酸化膜が弾性ひずみ限界を超え、それ以上では粘性流動が支配的な応力緩和が生じるときの応力である。さらに、もし酸化膜の粘性係数が応力に依存しないと仮定するなら(もしくは低応力を仮定)、このモデルはこれらの実験で使われる低温酸化では、欠陥のない STI はできないと予測される。我々の結果は高応力レベルにおける粘性係数の低下が酸化起因応力モデルの本質的な特徴であると示唆している。

[14] の解析は STI 構造が酸化中の応力を発生させるのに主たる要因にいかになっているかを、より詳細に規定している。トレンチとアクティブエリアの寸法比(Wt/Wm)も。応力を決める役割を果たしている。直観的予想によると、同じ Wt/Wm 値と酸化条件に対しては、小さい構造のほうがより高い応力が発生する。パターン A,B(Fig.6)の断面をいくつか解析すると、パターン A がより高い応力を蓄積しやすいことが、単純なこの STI モデルによって予測される幾何学的効果によって、説明できる。このような複雑なプロセスが、変わった物理的推測に基づいたこの単純モデルに効果的に取り込まれていることは間違いない。それでも、モデルの限界を知っておく必要もある。

この単純モデルの本質的な特徴は、これが平面ひずみ解析に基いていることである。このモデルのアプローチの限界は Fig.6 のパターンを試験することによってわかる。パターンに垂直・水平のどのような切断面も、解析の断面図として定義する。平面ひずみ解析の妥当性は近接の平行な面が解析する面と同じかどうかの仮定に掛かっている。平面ひずみは Fig.6 のパターンのコーナーや湾曲した表面で近くでは明らか妥当ではない。大きな応力はコーナーで生じるため、これは、このようなモデルの大きな欠点である(次章で議論する)。もう一つの欠点はトレンチ側壁の酸化速度が同じ結晶方位の平坦な表面と同じと仮定している点であり、これは必ずしも正しくはない。2 章で我々は酸化速度が応力に強く依存すると指摘した。高応力場ではトレンチ側壁に沿った酸化速度は低応力の場合よりも遅くなる。STI モデルは酸化膜で埋め込まれたトレンチとシリコンのメサを通して応力を空間的に平均化してしまう。よって、STI の局所的な応力は予測できない。

モデルの欠点を適度に処置するには、かなりのより精巧なアプローチが必要である—最低限、三次元の応力解析で三次元の酸化モデルを含む。この見地からは、現在のモデルの威力は容易に理解できる。その限界にもかかわらず、実験的に観察される応力発生の傾向は正確に予測でき、酸化起因応力をプロセス条件とパターンの幾何学的形状の関数として、直観的な理解に理解できるのだ。

## 4 イオンインプラによって生成される転位

これまでの議論は酸化条件やシリコンパターン形状がどのように IC 構造の酸化起因の欠陥生成の発生度を決めているのかについて例示した。シリコン基板の応力を最小にする酸化条件や素子構造によって、転位生成確率を最小にしても、実際の IC 構造において換算に応力の蓄積を回避することは無理である。肝心なのはどの程度の応力まで基板は転位発生に耐えうるのかという点である。イオンインプラのプロセスはこのレベルを決めるのにしばしば重要な役割を持つ。



イオンインプラは、その性質上、基板の結晶構造を壊す。続く高温アニールはダメージ回復とドーパントの活性化のため常に必要である。たとえ無応力の基板でも、アニール後までインプラのダメージは常に残留する。ダメージが空間電荷領域の外にある限りは、これらの残留欠陥はデバイスに有害ではない。しかし、不幸なことに、応力が生じると、これらの欠陥は転位となって、インプラ領域の外へ大きくすべり運動をしてしまう。この効果の低減のためには、インプラなしでは耐えうる応力レベル以下に応力を下げる必要が出てくる。

バイポーラ IC プロセスからの例を使って、イオンインプラの欠陥生成への効果について例を示す。3章の例のように基板の応力は素子分離工程で発生する。しかしながら、ここでは異なった素子分離法を用いる。使われている手法は”deep-trench isolation”である。Fig.10 に素子分離トレンチの製造に使われたプロセスシーケンスを示す。トレンチは SiO<sub>2</sub>/SiN 層をエッチマスクとして 4.5 $\mu$ m 深さにエッチングされる。化学エッチングを施したあと、RIE ダメージを取り除くために 300nm の酸化を行なう。この段階でトレンチは Fig.10(b) のようになる。埋め込んだ subcollector の深さ部分でトレンチが広がっていることに注意されたい。これは、RIE ダメージ除去時の n+層の選択エッチングによる効果と、n+シリコンの酸化速度が速い効果による。トレンチ構造はトレンチ底からエッチングで酸化膜を取り去り、PolySi を埋め込み、表面を平坦化し、酸化膜のキャップを成長させることにより完成する (Fig.10(c))。

トレンチ作成の応力蓄積には多くの要素がある。酸化プロセスから発生する応力、シリコンと酸化膜の熱膨張率差の違いから発生する応力、PolySi の真性応力から発生する応力 (PolySi の真性応力の議論は次章に後回しする。PolySi で埋め込まれた DRAM キャパシタトレンチを扱う)。これらは、素子分離トレンチの三次元的性質のためさらに複雑になる。Fig.10 の断面図はどのように応力が生じるのかをほんの部分的に例示したものである。上から見ると、素子分離トレンチは回路設計により、曲がりくねったパターンにレイアウトされた環状の凹地として見える (Fig.11, Fig.12)。トレンチが角を作るところは、大きな応力が生成される—それは、Fig.10 に示すような断面構造の平面ひずみ解析結果よりも、さらに大きな応力である。素子分離トレンチの全体の応力解析は Hu[55] によって示されている。3章の STI パターンのように、いくつかのセルパターンが試験された。あるセルレイアウトタイプでは、デバイスは完全にトレンチで囲まれるように分離されている (Fig.11)。妥当なプロセス条件 (温度・時間・酸化膜厚) により、転位の発生なしで望みの素子の”島”を作ることができる。しかしながら、続くインプラとアニール後に、セルに、高密度の転位列が現われた。この問題を Fig.11 に示す。part(a) で示された領域に [P] のインプラを行なった。このインプラは埋め込まれた subcollector を接続するために使われ、”reach-through”インプラとして知られる。[P] の活性化のためのアニール後、インプラを受けたセルのコーナー近くですべり転位が発生した。セルの平面顕微鏡写真より見られる通り (Fig.11(b))、転位はインプラ領域の外へすべっている。この写真では見にくいですが、このすべり転位は近接の {111} 面へ交差すべりできる。このプロセスによって、転位は最初のすべり面に留まるよりも多くすべり、セルの大部分が転位で埋め尽くされてしまう。

インプラを受けなかった類似のパターンではこのようなタイプの欠陥は現われなく、同じインプラとアニールを受けたパターンがないウェーハでも現われなかった。

なぜ、インプラは転位を発生させるのか？欠陥生成の原因であるプロセスの正確な詳細は、はっきりとわかっていない、しかし状態の筋のあった記述は以下の通りである。素子分離プロセス後、トレンチ周りのシリコンにはある程度の残留応力が存在している。しかしながら、転位を発生させるには至っていない。インプラプロセスはシリコンに点欠陥と乱れた拡張領域を作る。一旦転位が作られると、シリコンの応力がそれらをすべらせる。すべりを起こすのに必要なエネルギーは転位生成のエネルギーよりずっと小さいため、すべり過程は低い応力でも容易に起こりうる。

別の実験が転位発生の問題にさらにヒントを与えてくれる。Fig.11 に示すような転位は、POCl<sub>3</sub> のような化学源からのリン拡散を使えば回避できる。この結果は2つの理由で興味深い。ひとつに、リンの共有結合半径はシリコンより小さいので (それぞれ 1.10 Å : 1.17 Å)、ミスフィット応力がトレンチ起因ひずみに加算され、シリコンが臨界せん断応力を超えた応力をうける可能性が常にある。リン拡散の実験は、我々のケースにおいてはミスフィットひずみが転位発生に大きな役割を果たしていないことを示唆する。第2に、POCl<sub>3</sub> からのリン拡散は格子間シリコンを作り、それは酸化プロセスよりもかなり高いレベルであることは知られている [57]。もし、応力起因の格子間シリコンの凝集が転位発生に影響するなら、酸化や POCl<sub>3</sub>

拡散よりも、イオンインプラによって導入される格子間シリコンは定量的になんらかの違いがあるはずである。インプラのケースでは、続いてのアニールの初期に、結晶領域中に格子間シリコンのクラスタが含まれる。これは、転位生成の核として働くであろう。対して、酸化や  $\text{POCl}_3$  拡散は基板に比較的一様な点欠陥が導入されると予測される。加えて、イオンインプラは時に、瞬間的な増速拡散 (TED) を引き起こすことがよく知られている。TED とは、活性化のアニールの最初の 2,3 秒で大きな増速拡散が起こり、続いて、通常の拡散速度に戻ることである (Michel[58] の記事を例として見よ)。とても短い時間での大きな増速拡散は、点欠陥の過飽和が大きく起こっていることを意味する。これは単純に酸化や  $\text{POCl}_3$  拡散よりイオンインプラは点欠陥の大きな過飽和が起こっているということである。点欠陥の凝集に代わるものとしては、インプラ後に、転位に変化するようなシリコンの乱れた拡張領域ができる。

Fig.11 のセルデザインの転位をなくすためには、酸化起因応力をさらに小さくするような新しいプロセス条件を見つけなければならない。2,3 章にはどのようにこれらを為すかの例が示されている。別の方法として、セルデザインの変更があげられる。これの一つは応力蓄積をしにくくする変更である。この改良したセルデザインを Fig.12 に示す。このレイアウトは応力起因の転位発生を著しく低下させる。Fig.12(a) に示す通り、リンインプラの領域はトレンチエッジから離れて位置している、特に、トレンチが交差するコーナからは出来るだけ遠く離している。Fig.12(b) は Fig.12(a) に示す領域の TEM 写真である。表面まで伸びた転位ハーフループがリンインプラ領域で見られる。重要な点はこれらの欠陥がインプラ領域の外へ広がらず、デバイスの性能に有害な効果を及ぼしていないことである。

この章で提示した例はイオンインプラが転位の核を作るため、シリコンの臨界応力を著しく低下させてしまうをはっきりと示している。転位をすべりによって移動させるのに必要なエネルギーは、生成障壁より何桁も低いため、インプラによって生成された転位はそこそこの応力で、引き続いて、すべり・増殖することができる。3 章の STI の例は、酸化条件とレイアウトがどのように、IC 構造の転位発生に大きく影響し得るかを示した。示した例はイオンインプラ工程は許容できるプロセス条件の選定を強いることを明らかにしている。

## 5 DRAM トレンチキャパシタ プロセスの転位

次に、描画が正しく制御されていない場合に 4MbDRAM セルのトレンチキャパシタから発する転位の起源についての実験をする。制御されないプロセスからの点は圧倒的にあるイオンインプラの工程で生じ、(TEM 観察によると) トレンチキャパシタから増殖するにつれ、特徴的な形を形成するのが観察される。ここまではわれわれは転位の有害な効果を避けることができる条件を明らかにするために、TEM の使用について述べた。今、転位の運動を引き起こす応力源の性質を推測するために、転位の形状の研究に焦点を合わせる。この解析は転位生成を避けるプロセス開発の方法を示してくれる。

ここで議論される転位の問題と解析は、ある特定の IC 構造と結びついているわけではないことは、あらためて言うまでもない。トレンチ構造に関することに焦点を置くが、同様なことはトレンチ構造がない IC にも当てはまる。より例が Onishi[2] らの最近の研究によって示されている。彼らは、平面キャパシタ DRAM の応力起因の転位生成を試験した。

### 5.1 転位生成

Fig.13 は PMOS の形成を含む、4MbDRAM の製造工程を描いている。メモリ駆動時に、PMOS トランジスタとキャパシタ間の電荷移動によって、トレンチキャパシタから電荷が読まれ、蓄えられる (トランジスタとキャパシタの電気的な接続は図に示されたプロセスの時点ではまだ形成されていない)。トレンチキャパシタ [Fig.13(a)] が RIE によって形成され、トレンチ内部を 3 層の oxide/nitride/oxide 絶縁膜で裏打ちして、ポリシリコンで埋め込み、平坦化する。素子分離は semirecessed(半後退) 酸化プロセス (SROX) によって為される [Fig.13(b)]。oxide/nitride 層がデバイスのアクティブエリアを覆い、露出しているシリコンの残りは酸化される。トレンチは酸化中に部分的に nitride で覆われる。プロセスの中核点は Fig.13(c) で示されるステップで起こる。ソース/ドレインはボロンのイオンインプラによって形成される。アニール

の直後 (800 °C以上の温度)、すべり転位がトレンチ近接で発生し、transfer デバイスへと増殖する。転位は {111} 面上にあり、[110] 方向へすべる。この欠陥はイオンインプラが SROX プロセスの前に行なわれていなければ出現しない。また、SROX プロセスを省いても出現しない。よって、トレンチと素子分離構造はそれ自身は転位を作るような高い応力は持っていない。実験の観察によると、すべり転位はインプラ領域のいくらかの応力にアシストされ、インプラのダメージから出現する。Fig.13(b) のトレンチキャパシタの左側の絶縁膜ライナに沿った縦型バースピークの出現に注意されたい。これはポリシリコンとその周りのシリコンの間に”くさび”を打つのと似ている。3章の議論は、浅いトレンチの側壁の端にくさびを打つ垂直酸化と類似しており、ライナーに沿った酸化は周囲の基板に大きな応力の蓄積をもたらすと予測される。しかしながら、酸化が起こっていないサイドでは欠陥が観察されない。この結果はボロンのインプラによる転位の生成の重要性を示す。Fig.14 にソース/ドレインインプラ前のシリコン基板の応力の FEDSS シミュレーションから得られたコンターを示す。インプラと欠陥発生は Fig.14 のトレンチ右側で起こる。コンターは欠陥がある面の分解せん断応力の計算結果である (縦軸、横軸はそれぞれ [001],[110] 方向である。コンターは (111) 面の  $[1\bar{1}0]$  方向の分解せん断応力である。)

Fig.15 は DRAM セルの平面 TEM 像である。ゲート酸化とゲート伝導体と酸化素子分離はデバイスから除いた。化学的に裏面から削った。トレンチキャパシタはシリコンに付随したままである。その領域は Fig.15 の暗い部分に現われている。なぜなら、トレンチが電子顕微鏡の電子が透過しない程深いからである。転位はトランジスタに接したトレンチのエッジ近くの表面からソース領域へ走っているのが見られる。

このような転位生成の回避は 4 章 (Fig.11,12) でのディープトレンチ分離の例で使われたものとは異なるアプローチにより達成された。セルのレイアウトを変えるよりも、転位の原因となる応力源を調べ、欠陥生成を軽減するようにプロセス条件を修正した。原則的に、セルのレイアウト変更は転位の軽減のためには有効な方法である。例えば、デバイスのソース領域をトレンチキャパシタより遠くへ移動し、二つを金属のストライプで接続するような方法である。しかし、このアプローチは許容外の大きなセルサイズを作ることになり、一結局、密度が新しいメモリチップの開発の大きな駆動力となっている一プロセスにさらなる複雑さをもたらすこととなる。

今度のケースの転位はシャロートレンチの酸化で作られたもつれた転位より、より規則的な形態をしている (Fig.8)。特徴は Fig.16 に見てとれる。この図は DRAM 構造の三次元的性質を例示するものでもある。弓なりになった転位線が 111 面にあり、インプラを受けたソース領域と交差している。バーガースベクトルはこの面にあり、それは転位がすべり可能であることを示している。また、その方向はウェーハ表面と 45° の角度がある。個々の転位線の形はトレンチを通る中央面 (断面 A1-A2 で示す) に対称ではなく、バーガースベクトルの方向へ湾曲している。よって、深く侵入している部分は純粋な刃状転位の方位に近い (Fig.15 において、この断面はとても深く、電子顕微鏡試験片の薄膜化において取り除かれてしまった)。バーガースベクトルの符号はコンベンショナルな回折干渉法によってわかる。

もし、転位線が曲率の中心に向けて崩壊するなら、(これは転位を観察位置まで運んだ駆動力と反対の力)、転位の起源となった場所がわかるはずである、そして、その位置はインプラを受けた領域にあたる。観察された形状を延長すると、結晶の連続性より、転位と表面が交差するところに、転位線に沿った表面のステップ (段) が生じることになる。観察されたバーガースベクトルの符号によると、断面に沿って表面を短くするようなステップが必要となり、それは圧縮が生じていることを示す。このステップは Fig.16 の A1-A2 断面を指す。

## 5.2 応力解析

開発した応力解析は、定量的評価を行なえるレベルで使用することが十分可能である。転位はすべりを起こす応力と、それと反対の力がつりあう場所に残されている。すべりを起こす応力は {111} すべり面、バーガースベクトル方向の分解せん断応力である。反対向きの力は、摩擦応力、線張力応力、他の転位との相互作用による応力である。Fig.15 の再外部の転位は、もっとも深く貫通しており、他の転位に邪魔されず動き、大きな曲率半径にまで広がった。よって、摩擦応力のみがすべりを阻害しているものと推論できる。転位線の形状は、プロセス起因のせん断応力が摩擦応力まで減少する位置を実測するのに使える。せん断

応力の空間分布は、確かな解析的近似より得られたモデル計算と比較できる。

次の解析は、J.Vanhellemont[59,60] によるシリコン基板のフィルムエッジ起因転位の完成度の高い解析と似ている。彼らは、完全な Peach - Koehler の関係式を使い、転位に働く力の解析を提示している。本研究においては、単純化が適切である。Peach-Koehler 則はすべり面の分解せん断応力に比例したすべり力を与え、その他の力はすべり面に垂直な成分である。後者の力は、転位片をすべり面外に上昇運動させる。これには点欠陥の吸収/放出が必要である。これは、自己拡散が十分に高かったり、点欠陥の過飽和があるときにのみ起こる。上昇後は、転位はねじれた形状で残り、すべり面、すべり方向のような応力に関連した特徴的な要素では記述できなくなる (Fig.16(a) に示す)。本解析は、すべり力のみ取り扱う。すべきことは、モデルの応力源としての仮定と、観察されるすべり系におけるせん断応力の算出である。キャパシタトレンチには、2つのモデルが考えられている。

一つめのモデルは開口幅よりも非常に大きな円柱栓である (Fig.17)。このモデルの選定はプロセスシーケンスから決められた。第一に、穴が基板に掘られ、薄い絶縁膜で裏打ちさえる。その後、CVD ポリシリコンによって埋め込まれ、概してデポプロセスは真性ひずみを持った膜を形成する。CVD ポリシリコンも例外ではない。数多くの研究が薄いポリシリコン膜を平面基板にデポしたときの真性応力について為されてきた [61-66]。ポリシリコンは圧縮の真性応力を持つ。応力の圧縮の性質は転位の TEM 解析とも一致する。

二つめのモデルは一つめを変えたものである。栓の上部のみを開口に対して大きいと仮定した。このモデルはトレンチが以前に酸化されていないならば、インプラ後でも転位は生じないという事実を考慮して構築した。集中的な栓の上部の膨張は、シリコンに圧縮を誘起する表面酸化の効果を近似するはずである。

開口に対して均一に大きい栓のモデルの解析をいくらか詳細に示す。単純化のため、無限大の平面中の円形の栓を考える (平面応力)。実際のトレンチは円形でなく、ウェーハ厚すべてには掘られていないが、Saint-Venant's の原理によれば、このモデルは転位が観察されるトレンチの開口部の領域に対しては適当な近似である。応力集中源の表面から、表面での力の変化領域のサイズに比べて大きく離れた位置では、もし、現実の系と、理想化されか応力源の正味の合力が等しければ、応力分布は応力源の正確な形状に依存しない。

Timoshenko の熱応力の章から [67]、熱収縮ひずみの違いを真性ひずみで置き換えることによって、応力が記述できる。円柱座標系では、主要な成分は圧縮の径方向応力と引っ張りのフープ応力である。

$$\begin{aligned}\sigma_r &= A/r^2 \\ \sigma_\phi &= A/r^2 \\ A &= \frac{1}{2}\varepsilon ER^2\end{aligned}\tag{9}$$

$\varepsilon$  は栓が開口にフィットするために圧縮されるべき真性ひずみである。E はヤング率 (シリコンでは  $1.6 \times 10^{12}$  dynes/cm<sup>2</sup>)、R は栓の半径、これはこの章のはじめに議論した DRAM セルのキャパシタトレンチの断面図 (R=0.85 $\mu$ m) と同じにした。

しばしば、応力源のモデルの座標系は直交系ではない、座標系はウェーハのパターン方向に沿った座標系に変換されなければならない。この座標系を Fig.18 に示す。このケースでは、3つの応力成分が生じる。2つの垂直応力と1つのせん断応力である。

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= A(y^2 - x^2)/(x^2 + y^2)^2, \\ \sigma_{yy} &= A(x^2 - y^2)/(x^2 + y^2)^2, \\ \tau_{xy} &= -2Axy/(x^2 + y^2)^2,\end{aligned}\tag{10}$$

最後に、これらの成分から、異なる軸間の方向余弦を係数とした分解せん断応力を求める。ここでは、Fig.18 で示されているような結晶方位指標の矛盾のない組み合わせが役に立つ。Fig.18 に示すような、すべり面の法線方向 ([111]) とバーガースベクトルの方向 ( $\bar{1}01$ ) と  $[0\bar{1}1]$ ) によって、分解せん断応力はそれぞれ以下ようになる。

$$\begin{aligned}\tau_{b1} &= (-\sigma_{xx} + \tau_{xy})/\sqrt{6}, \\ \tau_{b2} &= (-\sigma_{xx} - \tau_{xy})/\sqrt{6},\end{aligned}\tag{11}$$

平面応力近似の選択により結果に深さ依存はない。分解せん断応力  $\tau_{b1}$  のコンター図を Fig.19 にプロットする (任意のスケール)。それぞれのコンターは x 軸と  $22.5^\circ$  の角を為す破線との交点で、応力源の中心からの距離が最大になる。この交点に沿って分解せん断応力は以下の式となる。

$$\tau_{b1i} = \frac{A}{\sqrt{3}r^2}\tag{12}$$

ここで  $r$  は栓の半径である。 $\tau_{b2}$  に相当する図は平面  $y = 0$  (Fig.16 の断面 A1-A2) に対しての鏡像となる。これらのコンター図はせん断応力値のウェーハ表面に平行な面への投影図と考えることが出来る。TEM も、転位のすべり面から表面に平行な面への投影である。よって、Fig.15 と Fig.19 は直接比較できる。

コンターの  $y = 0$  平面に関しての非対称性は Fig.16 の中央面 A1-A2 に関する転位線の湾曲の非対称性を正確に反映している。この結果は、定性的に、仮定された応力源の妥当性を支持する。定量的な見積りもまた可能である。以前の議論によれば、もっとも移動した転位の形と位置は、プロセス起因の応力が摩擦応力に打ち消されるコンターを記す。最も深い部分のコンターと摩擦応力  $\tau_c$  を等しいとすることによって、応力源の  $A = \varepsilon ER^2/2$  の値を見積もれる。A に最も寄与するものは、トレンチを埋めている物質の真性応力  $\varepsilon$  である。式 (12) によると

$$\tau_c = \frac{\varepsilon E}{2\sqrt{3}} \left(\frac{R}{r}\right)^2\tag{13}$$

最も遠くへすべった距離は Fig.15 のような写真から計測され、 $r = 1.9\mu\text{m}$  が与えられる。この値を使うと式 (13) より以下の値が得られる。

$$\tau_c = 0.9 \times 10^{11} \varepsilon \text{ dynes/cm}^2\tag{14}$$

摩擦応力の値は多くのパラメータ、温度、酸素量、シリコン材料の熱履歴に依存する。最新の考察は Vanhellemont [59,60] らによってまとめられている。 $\tau_c$  の値は  $0.1\text{-}1 \times 10^8 \text{ dynes/cm}^2$  の範囲内におさまる。この値を式 (14) に代入すると、転位を観察位置にまで押し出すためにトレンチ内にあるべき圧縮の真性ひずみ  $\varepsilon$  を見積もることができる。我々は  $\varepsilon$  は  $0.1\text{-}1 \times 10^{-3}$  内と見積もった。この値は別の研究<sup>2</sup>とよく一致する。よって、トレンチ領域の応力源を膨らんだ円柱の栓でモデル化することは妥当と結論できる。

ウェーハ表面に膨張中心が集中したもう一つのモデルについて同じ解析を行なう。解析な解は Nowacki の弾性半空間の熱弾性ひずみの核の応力式 [68] より得られる。このモデルによると膨張した栓モデルよりもすべり面上のせん断応力は急速に減衰する。表面が膨張中心であるモデルは  $1/r^3$  依存で、膨張した栓モデルは  $1/r^2$  依存である。また、せん断応力の湾曲したコンターは Fig.19 のコンターに比べ、膨張中心モデルのほうが顕著ではない。表面で集中する膨張中心を仮定することによって予測される急激な減衰は、観察される転位の貫通深さを説明できない。

SROX ステップがない場合は転位が形成されないことを考えると、膨張した栓モデルのみでうまくいくのは少し意外である。なぜなら、このモデルはトレンチを埋め込む真性応力のみを考慮し、SROX プロセスを考慮しないからである。さらに詳細に計算のコンターの形状と転位の形状を比べると、トレンチ付近では、Fig.19 の膨張栓モデルの予測が TEM 観察とずれていることがわかる。転位はモデルの予測よりもトレンチ面に平行に横方向へより広がっている。モデルの予測からのずれはある程度予測可能である。円形の栓の近似はトレンチ壁近くの正確さを欠くことになる、なぜなら、この領域の応力分布を決めるのは実際のトレンチ形状が重要となるからである。しかし、転位の横方向の広がり、トレンチ表面近くに集中する応力源の存在とも矛盾しない。これはもちろん SROX 酸化から生じる応力である。

応力解析と TEM 観察を結び付けることによって、トレンチのポリシリコンの真性応力が、転位を深く侵入させていると結論する。トレンチからの放射状の圧縮応力は転位の形状をととても有効に予測する。しか

<sup>2</sup>J.V.Niccoli,unpublished work,March 1988

しながら、この応力のみが転位の伝播に関与しているわけではないことがわかっている。酸化起因の応力も影響するはずである。SROX プロセスによる酸化起因応力 (短距離応力) がすでにトレンチ周囲に存在し、転位をトレンチエッジから放出する応力に加算される。最終的な転位の形態と侵入深さはトレンチの埋め込みから生じる長距離応力によって決まる。

### 5.3 転位の軽減

DRAM セルの転位生成の軽減のためには、一般的に 2 つのアプローチがある。基板の応力を軽減することと、転位生成源をなくすことである。実際には、より簡単に改良できるアプローチが採用される。酸化起因応力の軽減は酸化温度を上げることによって為される。詳細は 2 章に議論している。許容できる最大温度は許容できるドーパントの拡散で決まる。その他、プロセス工程のはっきりしていない改良も応力を減らすのに用いられる。例えば、マスクのナイトライドの厚さや、パターン形成時にマスクナイトライドの下の酸化膜に生じるアンダーカッティング量を変えることである。FEDSS のようなプロセスシミュレーションは、これらのタイプのプロセス改良が、どのように基板の最終的な応力量に影響するかを調べるのに適している。プロセスシミュレーションは、また、異なる熱サイクルから起こるドーパントの拡散量を見積もるのにとっても便利である。

TEM 解析はポリシリコンから生じる応力が転位生成の重要な要因であることを同定するのに使われた。数多くの研究 [61 – 66] で、アズデポのポリシリコン膜の真性応力量がデポ方法、ポリシリコンのドーピングレベル、膜の酸素量など、色々な要素に依存することが示されている。これらの研究では、引き続きアニールでアズデポの値から応力値が変化することも示されている。幸運なことに、数多くの異なる種類のデポ、ドーピング、アニールがあり、これらは、最終的なキャパシタプレートとして動作する際の電気的な要求に対しては互換性がある。実際に、最も低応力のポリシリコン埋め込みトレンチを作るプロセス条件は一般的に実験によって見つけることができる。

イオンインプラによる欠陥生成は有害な転位を生成するのに必要な応力レベルをかなり低下させることができる。もし、いくらかのインプラステップを避けることが出来たなら、プロセス条件の選定においてより大きな柔軟性を持つことが可能であることは明らかである。しかしながら、イオンインプラは最近ではシリコンのドーピングに支配的に使われる手法であり、簡単にははずせないであろう。通常のインプラとアニール技術の興味深いものに、表面の薄い金属やシリサイド層へのドーパントのインプラ、基板内への外方拡散がある。金属やシリサイドはドーパントの高い制止力となり、ドーパントはインプラダメージと同様、層の内部に閉じ込められる。これまでは、シリサイドからの外方拡散の研究の第一の動機は、非常に浅い接合を作るプロセス開発からの要求であった。応力起因の転位の軽減に対する潜在力が、このドーピング技術を研究するさらなる駆動力となることが証明された。このような研究を継続するにつれ、IC プロセス要求と互換性がある別の拡散のアプローチが間違いなく出てくるであろう。

## 6 結言

応力起因転位の有害な効果の回避は、次世代の IC プロセスにおいて、よりやりがいのある仕事になるであろう。チップにより高密度に素子を実装し、アクティブ領域と素子分離領域を小さくすると、より大きな応力が蓄積することになる。加えて、ドーパントの拡散を最小にする低温プロセスへと向うにつれ、フロープロセスによる応力軽減に使用される物質の効用を押え込むことになる。

一方、我々の酸化起因応力とそのプロセス条件との関係についての理解は、ここ数年で大きく改善された。ますます精巧となる酸化モデルにより、酸化中の応力がどのようにシリコンコーナー部の酸化膜シンニング効果を引き起こしているかが、より理解できるようになった。これは前向きな発展である。高応力場下における酸化膜の形状を正確に予測するモデルは基板の応力の予測もできると予想される。我々は単に実験のマトリクスをこなし、TEM 観察で転位が見つからないプロセス条件を見つめるような段階から抜け出しつつある。ここでは、ポリシリコンで埋め込んだトレンチの応力と転位の進展を結び付けるために、どのように TEM 観察と応力解析が有効に使えるかの詳細な例を示した。対称的に、どのプロセス条件で転

位が現われたかを気にかけるだけで、酸化起因応力のみでは転位を生成できないとはっきりと結論できた。続いての研究では、デポしたポリシリコンによる応力を最小にするデポ条件・アニール条件を使うことによって、転位密度をかなり減らすことができることを示した。このような形の研究から、ICの応力源、デバイス・回路構造にそれがどのように現われるか、プロセスの変更や物質の特性の改善を通してのどのように応力が低減できるかに関する幅広い知識基盤が開発された。

現在の研究は転位発生のより深い理解のために向けられる。我々はインプラや酸化プロセス中に導入されるような過剰点欠陥がどうも転位の核を形成しているのではないかと信じている。しかしながら、それに関する詳細は今まではわかっていない。例えば、通常はエンドオブレンジ<sup>3</sup>の転位ループを形成する点欠陥が、応力下で、どのようにすべり転位に変わることがわかっていない。引張応力場では、格子間点欠陥が容易に凝集してTEMで観察されるような格子間原子性の転位を形成するにもかかわらず、しばしば、すべり転位は圧縮応力場で見られる。Fig.15のトレンチから放出されるすべり転位がその例である。明らかに、過剰点欠陥からすべり転位出現への遷移の理解が必要である。発生の詳細に関するさらなる知識があれば、どのように転位の形成を阻害できるかの新しいアイデアがわくかもしれない。また、もしかすると、我々の予測の力を向上できるかもしれない。それは、ある特定のプロセスや回路のレイアウトをみて、どの条件が転位生成の可能性を最小にできるかを定める能力である。

シリコン基板の応力起因転位に関することは、シリコン集積回路の分野では決して新しいことではない。しかし、今後も高密度実装へと進化が続くなら、そのような転位に関する我々の知識は、分野の要求に応えていく必要があるだろう。我々は、応力起因転位の制御は今後も魅力的な課題であり続けるが、成し遂げられる目標であると考えている。

---

<sup>3</sup>すべり転位でなく、フランク不動転位のようなバーガースペクトルがすべり面上にないような円形ループ。点欠陥の凝集によりできる。