

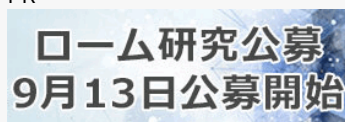
Oral presentation | 13 Semiconductors : 13.1 Fundamental properties, surface and interface, and simulations of Si related materials

📅 Fri. Sep 20, 2024 1:00 PM - 4:00 PM JST | Fri. Sep 20, 2024 4:00 AM - 7:00 AM UTC 🏨 C43 (Hotel Nikko 4F)

[20p-C43-1~11] 13.1 Fundamental properties, surface and interface, and simulations of Si related materials

Nobuya Mori(Osaka Univ.), Takashi Hasunuma(Univ. of Tsukuba)

PR



◆ Presentation by Applicant for JSAP Young Scientists Presentation Award

1:00 PM - 1:15 PM JST | 4:00 AM - 4:15 AM UTC

[20p-C43-1]

Vapor Phase Si Etching Assisted by Graphene Oxide (GO) with Photochemically Modified In-plane Structure

○YUTA GOTO¹, Toru Utsunomiya¹, Takashi Ichii¹ (1.Kyoto univ.)

1:15 PM - 1:30 PM JST | 4:15 AM - 4:30 AM UTC

[20p-C43-2]

Selective Etching of Semiconductor Surfaces with the Catalytic Effect of Nanocarbons -Hole injection at catalyst/semiconductor interfaces in contact with an etchant and attempts to control hole diffusion-

○Seiya Yamamoto¹, Junhuan Li¹, Kouji Inagaki¹, Kenta Arima¹ (1.Osaka Univ.)

◆ English Presentation

1:30 PM - 1:45 PM JST | 4:30 AM - 4:45 AM UTC

[20p-C43-3]

The influence of Ar/N₂ gas flow ratio on the electrical characteristics of ferroelectric hafnium nitride formed by ECR-plasma sputtering

○KANGBAI LI¹, Shun-ichiro Ohmi¹ (1.Tokyo Tech.)

1:45 PM - 2:00 PM JST | 4:45 AM - 5:00 AM UTC

[20p-C43-4]

Evaluation of Defect Distribution at SiO₂/Si Interface Generated by Electron Beam Irradiation

○Ryo Shimizu¹, Yasunari Sohda¹, Ryu Hasunuma¹ (1.Univ. of Tsukuba)

◆ Presentation by Applicant for JSAP Young Scientists Presentation Award

2:00 PM - 2:15 PM JST | 5:00 AM - 5:15 AM UTC

[20p-C43-5]

Defect state analysis of a-Al₂O₃/GaN interface using machine learning potential MD

○Koki Sato¹, Mutsunori Uenuma², Ryosuke Jinnouchi¹, Ryoji Asahi¹ (1.Nagoya Univ., 2.AIST)

2:15 PM - 2:30 PM JST | 5:15 AM - 5:30 AM UTC

[20p-C43-6]

Preparation of colloidal Si quantum dots embedded ion crystal powder

○Ryosuke Oshima¹ (1.Hosei Univ)

2:45 PM - 3:00 PM JST | 5:45 AM - 6:00 AM UTC

[20p-C43-7]

Transport Properties for P-doped strained SiGe/Ge grown on Patterned Si(111) Substrates

○Soichiro Takei¹, Syu Kikuoka¹, Jun Okutani¹, Syugo Ishibashi¹, Michihiro Yamada¹, Kohei Hamaya^{2,3}, Kentarou Sawano¹ (1.Tokyo City Univ., 2.CSRN Osaka Univ., 3.OTRI Osaka Univ.)

◆ English Presentation

3:00 PM - 3:15 PM JST | 6:00 AM - 6:15 AM UTC

[20p-C43-8]

Synthetic Image Generation of Microstructure Surfaces Using Physically Based Rendering Techniques

Zhen-Wei Tsai¹, ○(M1)Chao-Ching Ho¹ (1.Nat'l Taipei Uni. of Tech.)

3:15 PM - 3:30 PM JST | 6:15 AM - 6:30 AM UTC

[20p-C43-9]

Statistic prediction of threshold voltage variations of MOSFET caused by discrete impurities by machine learning

○Shota Seki^{1,2}, Keiichi Osada¹, Masaki Takaishi¹, Ryotaro Kasahara^{1,2}, Kentaro Kutsukake^{2,3}, Toru Ujihara^{1,2,3} (1.Aixtal, 2.Nagoya Univ., 3.IMaSS Nagoya Univ.)

3:30 PM - 3:45 PM JST | 6:30 AM - 6:45 AM UTC

[20p-C43-10]

Field-induced Current Switching in a Nanoribbon with Random Comb-like Structure

○Hajime Tanaka¹, Nobuya Mori¹ (1.Osaka Univ.)

◆ Presentation by Applicant for JSAP Young Scientists Presentation Award

3:45 PM - 4:00 PM JST | 6:45 AM - 7:00 AM UTC

[20p-C43-11]

Monte Carlo Simulation of Crystallographic Orientation Dependence of Electron Mobility in Semiconductor Nanosheets

○Jo Okada¹, Hajime Tanaka¹, Nobuya Mori¹ (1.Osaka University)

酸化グラフェンアシスト Si 気相エッチングにおける シート面内構造依存性

Vapor Phase Si Etching Assisted by Graphene Oxide (GO) with Photochemically Modified In-plane Structure

京大院 ○(M2)後藤 雄太, 宇都宮 徹, 一井 崇

Kyoto Univ., °Yuta Goto, Toru Utsunomiya, Takashi Ichii

E-mail: goto.yuta.53c@st.kyoto-u.ac.jp

シリコン表面微細加工技術の 1 つとして貴金属や炭素材料を触媒としたアシストエッチングが注目されており, 当研究室では酸化グラフェン (Graphene Oxide: GO) を用いたシリコンエッチングをこれまでに報告してきた¹. 従来の液相での GO アシストエッチングでは, 発生したガスによって GO が剥がれてしまうため, 大面積を均一に加工することが困難であった. 窪田はその解決法として, 気相でも同様に, アシストエッチング反応が進行することを明らかにした². しかし, そのメカニズムや律速プロセスは未だに明らかになっていない. 本研究では, GO シート面内の構造に着目して, シート内欠陥がエッチング速度に与える影響を調べた.

改良 Hummers 法で作製した GO を, 既報²を参考としたマイクロコンタクトプリンティング法にて(100)配向の p 型シリコン基板に担持した. さらに, この試料を高真空環境 (10^{-3} Pa 以下) で室温もしくは 140 °Cの加熱下にて真空紫外 (Vacuum Ultra Violet: VUV) 光照射することで光還元し, それぞれ rGO, rGO_140 とした. これら 3 種類の試料をフッ酸と過酸化水素からなるエッチャント蒸気に 50 °Cで暴露させることで, 気相エッチングを行った.

Fig. (a)に各試料のラマンスペクトルを示す. 高真空中 VUV 光照射によって 1600 cm^{-1} 付近の GO に由来するピークの位置がレッドシフトした. これは 1574 cm^{-1} 付近の G ピークの割合の増加を意味しており, VUV 光還元に伴う sp^2 共役結合の再構築が示唆された. 一方, これらの試料を 16 時間, 50 °Cで気相エッチングすることで得られた孔構造の深さを Fig. (b)に示す. 丸印はその深さの平均であり, 概ね 400 nm 程度となった. VUV 光照射によるシート面内化学構造の違いが気相中アシストエッチング速度に与える影響は小さいことが示唆された.

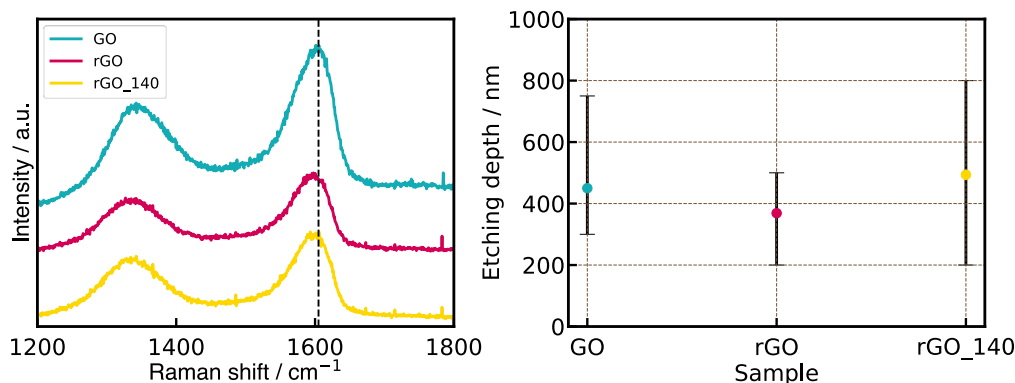


Fig. (a) Raman spectra of GO, rGO, and rGO_140. (b) Relationship between the samples and the etching depth after 16 h at 50 °C.

参考文献 (1) W, Kubota, et al., Langmuir 37, 9920 (2021) (2) W, Kubota, et al., ACS Appl. Nano Mater. 5, 11707 (2022)

ナノカーボンの触媒作用を援用した Ge 表面の選択エッチング

ーエッチング液と接触する触媒／半導体界面での正孔注入と拡散制御の試みー

Selective etching of Ge surface assisted by nanocarbon catalysis

- Effect of oxidant added to etchant on etching properties -

阪大院工 °山本 聖也, 李 君寰, 稲垣 耕司, 有馬 健太

Osaka Univ. °Seiya Yamamoto, Junhuan Li, Kouji Inagaki, Kenta Arima

E-mail: s.yamamoto@sie.prec.eng.osaka-u.ac.jp

金属アシストエッチング(Metal Assisted Chemical Etching: MACE)は、貴金属の触媒活性を利用した半導体表面の加工法であり、簡便・低コストに三次元構造体を作製できる手法である。我々は過去に、Pt 等の貴金属触媒を用いて、O₂ 溶解水中での MACE の系統的な調査を行った^[1]。しかし、加工後の Ge 表面に残留する貴金属汚染の除去が困難であるという問題に直面し、非金属触媒であるナノカーボン材料に着目した^{[2][3]}。そして、還元グラフェン、及び、酸化グラフェン(Graphene Oxide: GO)が O₂ 溶解水中で Ge 表面を選択的にエッチングする現象を見出し、その基礎特性を調査してきた^[4]。この際、窒素ドーピング等によりエッチングレートの向上を図ったが、そのレートは依然低い。O₂ 分子の酸化力が不十分であることに起因すると考え、エッチング液により強力な酸化剤を添加することによるレート向上を期待し、調査を行った^[4]。続いて、上記の結果を踏まえ、基板裏面にバイアス電圧を印可することで、本モードにおけるエッチングプロファイルを制御したいと考えた。そこで、Au 触媒を配した Si 試料を用いて、バイアス印可を行い、その有用性を調査した。

Fig. 1 に Ge 表面に単一層の GO シートが堆積した試料を異なる温度条件 (31°C, 58°C) で O₂ 溶解水中、及び、H₂O₂ 溶液(200 ppm)に 3 時間浸漬した Ge 表面の AFM 像を示す。O₂ 溶解水に浸漬した試料では GO フレーク直下の Ge 表面の酸化と溶解が促進されている一方で、H₂O₂ 溶液に浸漬した試料では GO フレーク直下に加えて、その周囲のエッチングが促進された。これは H₂O₂ が強い酸化剤であるため、Ge/GO 界面で消費される量より過剰に生成した正孔が周囲に拡散し、GO に覆われていない Ge 表面の酸化を促進したためであると予想している。

Fig. 2 に Au 触媒を配した Si 試料を 60°C に保った HF/H₂O₂ 混合溶液に浸漬し、バイアスを印加せずに MACE した試料、及び、-10 V のバイアスを印加して MACE した試料の SEM 像を示す。バイアスを印加していない場合、垂直方向に加えて、非垂直方向、特に表面近傍で望ましくない著しいエッチングが生じた。これは Fig. 1 と同様、過剰に生成した正孔が Si の側壁と上面に拡散、及び、消費されたことが要因であると考えられる。一方で、バイアス印加を行うことで、非垂直方向のエッチングが抑制されると共に、垂直方向のエッチング深さが増大した。これは、裏面のバイアスで形成される電界により、過剰な正孔が Si 試料の鉛直下向きに引き付けられたためであると考えられる。この結果から、バイアスを印加することにより、過剰に生成した正孔の拡散を抑制できることに加えて、エッチングレートの増加が期待できることが分かった。

References

- [1] T. Kawase et al., *ChemElectroChem*, **2** (2015) 1656.
- [2] T. Hirano et al., *Carbon*, **127** (2018) 681.
- [3] W. Kubota et al., *Jpn. J. Appl. Phys.* **58** (2019) 050924.
- [4] R. Mikurino et al., *J. Phys. Chem. C*, **124** (2020) 6121.
- [5] J. Li, S. Yamamoto et al., *Electrochem. Comm.* **163** (2024) 107735.

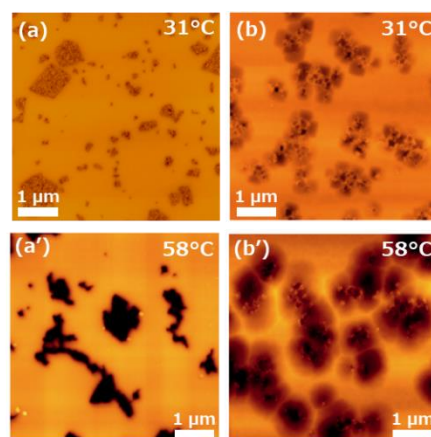


Fig. 1. AFM images of Ge sample surface etched for 3 hours in (a, a') O₂ dissolved water and (b, b') 200 ppm H₂O₂ solution.

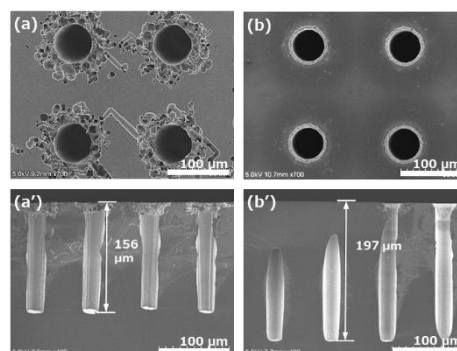


Fig. 2. SEM images of (a), (b) top and (a'), (b') cross-sectional views of the Si sample after MACE. (a, a') without applied bias and (b, b') with -10 V bias applied.

The influence of Ar/N₂ gas flow ratio on the electrical characteristics of ferroelectric hafnium nitride formed by ECR-plasma sputtering

Tokyo Institute of Technology, K. Li¹ and S. Ohmi²

E-mail: ¹li.k.ai@m.titech.ac.jp, ²ohmi@ee.e.titech.ac.jp

1. Introduction

The ferroelectric HfO₂ thin film has captured considerable interest due to its compatibility with Si and scalability. However, the formation of a SiO₂ interfacial layer leading to depolarization fields and degradation in device characteristics. We have reported that the ferroelectric HfN_{1.15} thin film formation on Si substrates without interfacial layer formation [1]. One of the issues of ferroelectric HfN_{1.15} thin film is the small memory window (MW) [2].

In this research, we investigated the influence of Ar/N₂ gas flow ratio on the electrical characteristics of HfN_x thin film to improve the ferroelectric properties.

2. Experimental procedure

A 100 nm thick field SiO₂ was formed on the p- and n⁺-Si(100) substrates followed by the active area patterning. Then, the 10 nm thick HfN_x insulator was deposited followed by the in-situ deposition of 10 nm thick HfN_{0.5} gate electrode by the ECR-plasma sputtering utilizing Hf target at room temperature. The Ar flow rate was 8 sccm, while the N₂ flow rate was changed as 6-8 sccm, which corresponded to the nitrogen concentration in the HfN_x of $x = 1.10-1.15$. Then, the post-metallization annealing (PMA) was carried out at 400 °C/5 min in N₂ ambient (1 SLM). Next, Al top contact was evaporated, and the gate electrode was patterned by wet etching. The fabricated MFS diodes were characterized by C-V and P-V measurements.

3. Results and discussion

Figure 1 shows the Ar/N₂ gas flow ratio dependence of C-V for MFS diodes. When the Ar/N₂ gas flow ratio was changed from 8/6 to 8/8 sccm, the EOT extracted by the dual frequency method was changed from 3.16 nm to 3.50 nm. Figure 2 shows the comparison of P-V for MFS diodes. The maximum remnant polarization (2P_r) of 1.60 μC/cm² was obtained in case of the Ar/N₂ gas flow ratio was 8/7 sccm.

4. Conclusions

The effects of Ar/N₂ gas flow ratio were

investigated. The improved ferroelectric property was realized by using the Ar/N₂ gas flow ratio of 8/7 sccm.

Acknowledgements

This work was partially supported by JSPS KAKENHI Grant Number 19H00758, NEDO, JSW, and CASIO Foundation.

References

- [1] K. Li *et al.*, JSAP spring meeting., p. 12-263, (2024).
- [2] S. Ohmi *et al.*, IEEE J. Electron Devices Soc., pp. 1036-1040 (2021).

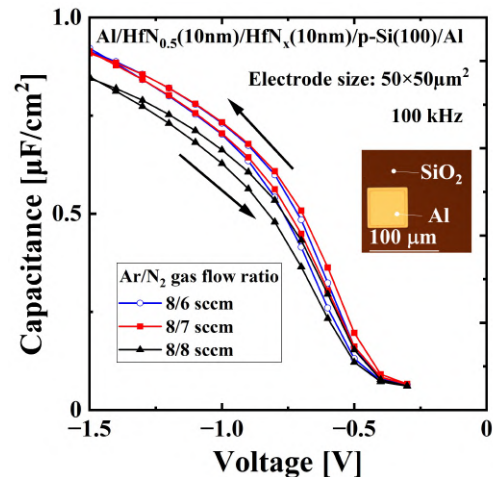


Figure 1. Ar/N₂ gas flow ratio dependence of C-V for the Al/HfN_{0.5}/HfN_x/p-Si(100) diodes

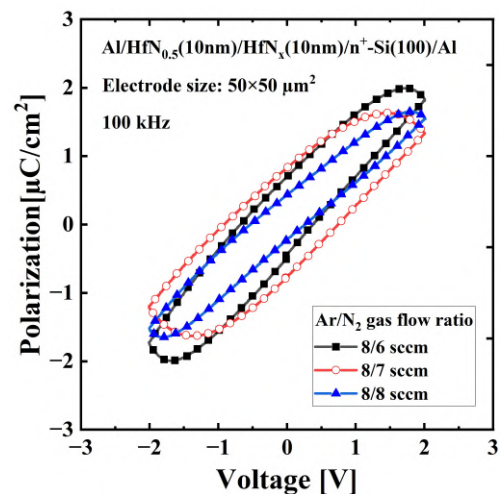


Figure 2. Ar/N₂ gas flow ratio dependence of P-V for the Al/HfN_{0.5}/HfN_x/n⁺-Si(100) diodes.

電子線照射により生成した SiO₂/Si 界面欠陥分布の評価

Evaluation of Defect Distribution at SiO₂/Si Interface Generated by Electron Beam Irradiation

筑波大学数理物質科学研究群 °(M2)清水 峻央, 早田 康成, 蓮沼 隆
Univ. of Tsukuba, °Ryo Shimizu, Yasunari Sohda, and Ryu Hasunuma
E-mail: s2320280@u.tsukuba.ac.jp

[研究背景]半導体デバイスの製造プロセスにおいてパターンの測長等に走査型電子顕微鏡 (SEM) が用いられている。電子線によるデバイスダメージが懸念されるため、一般的には低加速電圧 (2kV 以下) での測長が行われるがデバイスの微細化や3D化に対応するために高加速電圧での測長が求められる。このとき電子線量・エネルギーとデバイスダメージの関係を定量的に明らかにすることが極めて重要である。我々は特に MOS 界面に着目し、界面近傍の Si 基板欠陥を可視化する方法を考案し生成した欠陥の分布を調査した。

[実験方法と結果]本研究では、欠陥フリーの Si(111)表面が超低溶存酸素水 (LOW: ultra-low-dissolved-oxygen water) によるエッチングで原子的に平坦なステップ-テラス構造が得られることを利用した。すなわち電子線照射によって欠陥が生成した場合、欠陥を起点としたエッチングによるエッチピットとして欠陥分布を可視化できると考えた。標準的な RCA 洗浄後に、O₂100%雰囲気で厚さ約 150 nm の熱酸化膜を形成した。その後 SEM を用いて加速電圧 3 kV および 10kV で電子線照射を行った。照射後に熱酸化膜を剥離し、Si 表面に LOW を用いて平坦化処理を施し、電子線照射箇所を AFM で観察した。

AFM 観察の結果、LOW 処理後に電子線照

射領域にくぼみが存在することがわかった (Fig.1)。これは、電子線照射領域の Si のエッチングスピードが上昇したことを意味し、電子線照射によって SiO₂/Si 界面近傍に多数の欠陥が生成したことを示唆している。また、LOW 処理をさらに進めても深さが変化しないことが明らかとなった。さらに、電子線の照射量を増やしてもくぼみの深さが最大 3 nm 程度で変化しないことがわかった。これらの結果は SiO₂/Si 界面近傍では熱酸化時に蓄積された応力による結晶構造の歪みによって欠陥が生成されやすいためだろうと考えている。発表当日は上記結果に加え、電子線照射量と欠陥生成量の関係についても併せて議論する。

本研究の一部は日立ハイテックとの特別共同研究事業「アドバンスト SEM テクノロジー」の協力を得て遂行された。

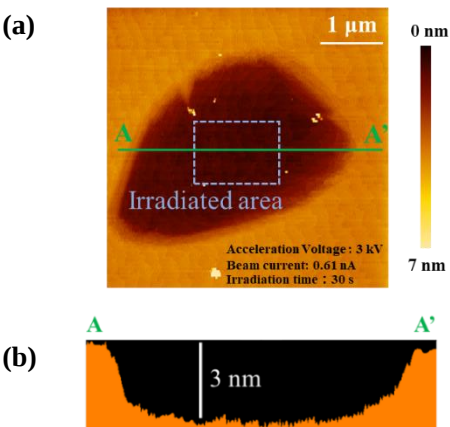


Fig.1 (a) AFM image of Si surface after 1-hour LOW etching and (b) the cross-section at A-A'

機械学習ポテンシャルMDを用いた a-Al₂O₃/GaN 界面の欠陥状態解析

Defect state analysis of a-Al₂O₃/GaN interface using machine learning potential MD

名大工¹, 産総研² ○(M1) 佐藤 昂輝¹, 上沼 睦典², 陣内亮典¹, 旭 良司¹

Nagoya Univ.¹, AIST², °Koki Sato¹, Mutsunori Uenuma², Jinnouchi Ryosuke, Ryoji Asahi¹

E-mail: sato.koki.e0@s.mail.nagoya-u.ac.jp

GaN を用いた半導体デバイスは、省エネ、省資源に大きな役割を果たす次世代のパワーエレクトロニクスとして注目されている。GaN を基板に用いたパワーデバイスにおける大きな課題のひとつは良質な絶縁膜の形成である。ゲート絶縁膜としてアモルファスアルミナ (a-Al₂O₃) を用いた場合、その形成時に熱酸化により酸化ガリウム層 (GaO_x) が生成され、それによる欠陥準位や固定電荷がデバイス特性の低下や劣化要因となることが指摘されている。一方、酸化ガリウム層を適切に制御することで高品質な界面が形成される可能性が実験により示唆されており[1], 界面構造と物性の詳細な理解が望まれている。そこで本研究では、a-Al₂O₃/GaO/GaN 界面の原子モデルを機械学習ポテンシャル分子動力学シミュレーション (MLP-MD) [2]によって生成し、界面構造が物性に及ぼす影響を調べた。

まず、第一原理分子動力学計算を用いた液体急冷法によってアルミナをアモルファス化し、実験から提案された界面構造を参考に、a-Al₂O₃/GaO/GaN 界面モデルを作成した。次に、このモデルを用いた第一原理計算のデータを on-the-fly 法によって学習することで機械学習ポテンシャルを構築した。このポテンシャルを用いた MLP-MD によって、大規模モデル(約 1000 原子)に対して長時間緩和を行い、得られた構造の電子状態解析を行った。

a-Al₂O₃/GaO/GaN 界面モデルを 400–800 K で 1 ns 緩和させた構造に対して、第一原理計算によって欠陥構造を評価した結果、Ga-O 結合の未形成部分に欠陥準位が形成されることが分かった (Fig.1)。また緩和温度が高温になるほど、界面における Ga の拡散が顕著になり、欠陥準位の形成もより顕著に観察された。計算で得られた界面構造は、光電子ホログラフィ[1]から得られた界面原子の局所構造とほぼコンシステントであることが確認できた。一方、GaO 層を挿入しない界面では、Ga-O 結合の未形成部分や Ga-N 結合の消失による欠陥準位が観測された。これらの結果より、Ga-O 結合の形成を促進する条件下で欠陥準位密度が低減することが示唆された。

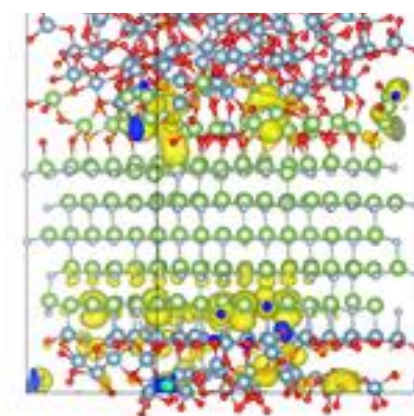


Fig.1: Interface structure of a-Al₂O₃/GaO/GaN where in-gap defect states are visualized (yellow).

(1) Uenuma et al., Appl. Phys. Express 15, 085501 (2022).

(2) Jinnouchi, Miwa, Karsai, Kresse, Asahi, J. Phys. Chem. Lett. 11, 6946 (2020).

シリコン量子ドットを充填したイオン結晶粉末の作製

Preparation of colloidal Si quantum dots embedded ion crystal powder

法政大院理工¹, 東京農工大² ○(M1)大島 遼裕¹, 越田 信義^{1,2}, 中村 俊博¹

Hosei Univ¹, Tokyo Univ. of A&T², Ryosuke Oshima¹, Nobuyoshi Koshida^{1,2}, Toshihiro Nakamura¹

E-mail: nakamura@hosei.ac.jp

1. 背景: Si は安価で環境に無害な材料であり、ナノサイズ化した Si 量子ドットは量子サイズ効果により可視光を示す。現在、光デバイスに应用されている半導体量子ドットは有害な元素である Cd や Pb を含むことが多く、Si 量子ドットこれらの代替材料として利用可能である。当研究グループでは、独自のプロセスより Si 量子ドットの効率的な生成に成功している^{1,2)}。しかし、Si 量子ドットは、大気中の酸素や水分による表面酸化が生じ、酸化に伴う欠陥生成によって発光効率が低下するという脆弱性を持つ。そこで、本研究では、Si 量子ドットの環境要因から保護し、発光安定性を向上させることを目的とし、Si ドットを充填した無機イオン結晶粉末の作製を試みる。

2. 実験方法: 陽極化成法により作製した多孔質 Si 粉末への低温加熱粉碎処理を施し、Si 量子ドットコロイドを得る。両極性溶媒であるテトラヒドロフランに Si コロイドを分散させ、塩化リチウムを溶解させたテトラヒドロフラン溶液と混合し、加熱乾燥することで塩化リチウムを再結晶させ Si 量子ドットを充填させた。

3. 実験結果: Fig. 1 の挿入図に Si 量子ドットコロイドを充填した塩化リチウム結晶の室内光および紫外光照射時の写真を示す。図より赤色発光が確認できる。また Fig. 1 は Si 量子ドット充填塩化リチウム結晶および Si 量子ドット分散溶液の発光スペクトルを示す。図より、

両方の試料において図より 680nm 付近をピークとするブロードな発光が観測されることから、充填塩化リチウム粉末からの赤色発光は Si ナノ結晶由来のものといえる。また本研究では、テトラヒドロフランに分散させる Si 量子ドットの濃度を増加させることで量子ドットの充填率の制御が可能であることを確認しており、最大で 9.4 %の充填率を得た。さらに、再結晶時の加熱時間の適切な選択により塩化リチウム結晶の粒形やサイズ変化が確認できた。

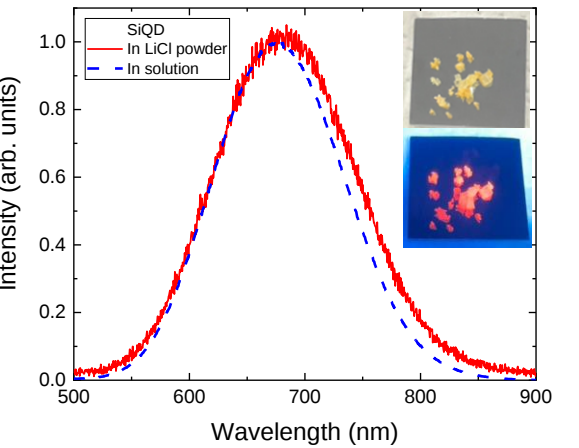


Fig. 1: PL spectra of Si quantum dot solution and that embedded in LiCl crystal powder. Inset shows the pictures of colloidal Si dot embedded LiCl under room and UV light illuminations.

参考文献

1) T. Nakamura et al., *APL Mater.* 8, 081105 (2020).
2) T. Higuchi et al. *J. Appl. Phys.* 135, 094303 (2024).

パターニングした Si(111)基板上に成長した
P ドープ歪み SiGe/Ge の電気伝導特性
Transport Properties for P-doped strained SiGe/Ge
grown on Patterned Si(111) Substrates

東京都市大学¹, 阪大基礎工 CSRN², 阪大 OTRI³

○武井 爽一郎¹, 菊岡 柊¹, 奥谷 惇¹, 石橋 脩悟¹, 山田 道洋¹, 浜屋 宏平^{2,3}, 澤野 憲太郎¹
Tokyo City Univ.¹, CSRN Osaka Univ.², OTRI Osaka Univ.³

○S. Takei¹, S. Kikuoka¹, J. Okutani¹, S. Ishibashi¹, M. Yamada¹, K. Hamaya^{2,3}, K. Sawano¹

E-mail: g2381246@tcu.ac.jp

1. はじめに Geや高 Ge 組成 SiGe は Si より高い移動度を有し、さらに歪み導入によってバンドエンジニアリングによる特性向上が可能である。さらに面方位(111)を用いることで強磁性体が結晶成長可能となりスピントロニクスデバイスに応用できる。一方、歪みによる結晶欠陥の発生が問題となり、その抑制が重要である。我々は、パターニングを行うことで欠陥の発生が抑制されることを報告しており、それによってキャリア移動度の向上が期待できる。本研究ではパターニングによって高品質歪み SiGe 層を形成し、高い電子移動度を得たので報告する。
2. 実験方法 フォトリソグラフィとドライエッチングにより、Si(111)基板にホールバー型のメサパターニングを行った。パターニングした Si 基板上に固体ソース MBE を用いて、低温 Ge 層(Tg = 350℃, 40 nm)、高温 Ge 層(Tg = 700℃, 400nm)を成長させた後、歪み SiGe 層(Tg = 350℃, 50 nm)を P のドーピング濃度を変えて作製した(Fig.1)。最後にホールバー試料に電極(Au)を蒸着し、室温でホール測定を行った。
3. 実験結果 ホール測定によるキャリア密度とホール移動度の関係を Fig. 2 に示す。キャリアは全て電子となり、歪み SiGe 層の伝導と考えられる。Ge の電子移動度の Irvin curve を黒線で示す。得られたプロットは Irvin curve と同様のふるまいを示すが、移動度の値は Irvin curve よりも高く、歪みによる移動度向上効果であると考察できる。さらに成長前パターニングを行っていないホールバーから得られた移動度よりも高くなり、成長前の Si パターニングが欠陥の抑制と移動度向上に有効であることを示している。本研究の一部は科学研究費補助金(24H00034、23H05455、23H05458、21H04635)の支援を受けて行われた。

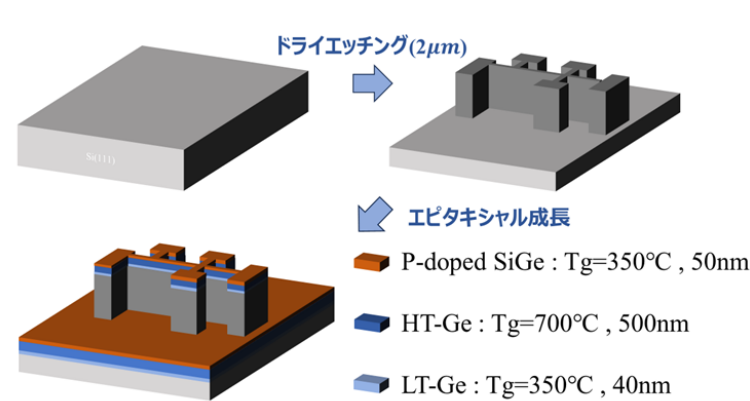


Figure 1. Fabrication procedure of P-doped SiGe/Ge-on-patterned Si(111)

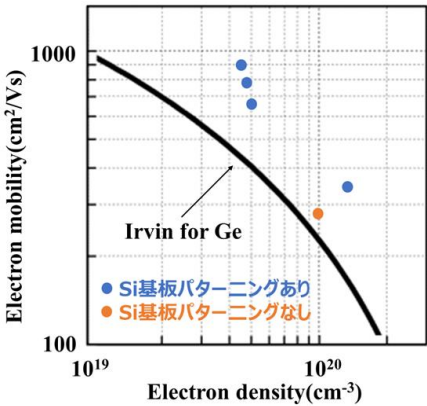


Figure 2. Electron Hall mobility against electron density for strained SiGe with various P-doping density on Ge/Si with and without pre-patterning

Synthetic Image Generation of Microstructure Surfaces Using Physically Based Rendering Techniques

Zhen-Wei Tsai¹, Chao-Ching Ho^{2*}

¹ Graduate Institute of Automation technology, National Taipei University of Technology, Taipei, Taiwan,

² Graduate Institute of Manufacturing Technology, National Taipei University of Technology, Taipei, Taiwan

E-mail: hochao@mail.ntut.edu.tw

1. Introduction

Among deep learning methods, robust and effective detection models often rely on a large amount of defect data. Insufficient or imbalanced defect data can have a negative impact on neural network training. However, the product production process aims at high yield, so defect data is difficult to obtain, which is inconsistent with the needs of training neural networks. To solve these problems, a physically based rendering method is adopted, using rendering software to build a virtual environment and generate many synthetic images [1]. This study introduces a method for synthesizing images of microstructure surfaces using physics-based rendering techniques. The method can be applied to objects with any micro-structured surface and can be rendered in any viewing direction and lighting conditions.

2. General Instructions

Microstructure Modeling

A 3D rendering engine is used and set the microstructure parameters to create the model. The groove size, depth and spacing were set during modeling in this study.

In the virtual environment, various parameters can be adjusted arbitrarily, such as the type and intensity of the light source, the size and position of the camera sensor, and even the material properties can be adjusted.

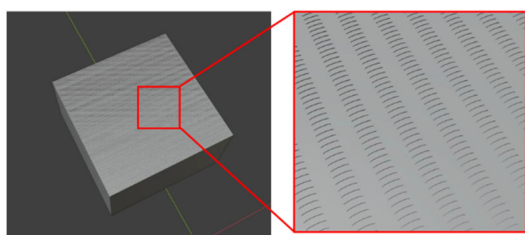


Fig.1 Magnified view of microstructure surface objects and their structures in the virtual environment.

Optical Path Difference Calculation

The variation in surface rendering depends on various factors such as viewpoint position, lighting environment, and wavelength. Due to differences in microscopic structures, a wide range of structural colors are produced. However, all structural colors result from the interference between multiple waves with optical path differences. Therefore, the optical path difference parameter alone can be used to represent various structural colors [2].

Representation of Interference Waves

The interference shader implemented in this study is based on the derivation results provided in [2]. The intensity

of the interference wave caused by the microstructure surface is expressed as:

$$I(\lambda) = \sum_{i=1}^n A_i^2 + \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n 2A_i A_j \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda}(\Delta_i - \Delta_j)\right) \quad (1)$$

Color Calculations

To visualize color, the spectral distribution needs to be converted to the RGB color system. The spectral distribution is first converted to the XYZ color system, which is the basis for every color system that serves as the CIE standard color system. This is obtained by integrating wavelengths in the visible region (360 to 800 nm) using the following formula: for simplicity, only the results for X are shown here:

$$X = \int_{360}^{800} R(\lambda) \cdot I(\lambda) \cdot \bar{x}(\lambda) d\lambda \quad (2)$$

Equation (1) is treated as reflectivity, so $R(\lambda) = I(\lambda)$, and replaced it with $R(\lambda)$ of equation (2). The XYZ color system is then converted to the RGB color system using conversion formulas [3].

3. Conclusions

This research uses rendering software to create virtual environments and objects to produce virtual images. Combining rendering software with physically based methods is discussed. It is capable of rendering diffraction and interference phenomena on microstructure surfaces. In the future, quantitative metrics will be needed to evaluate whether rendered images are realistic enough compared to real captured images.

Acknowledgements

This research was funded by National Science and Technology Council, Taiwan (Grant Nos. 112-2228-E-027-008).

References

- [1] Mohanty, S., Su, E., & Ho, C. C. (2024). Enhancing titanium spacer defect detection through reinforcement learning-optimized digital twin and synthetic data generation. *Journal of Electronic Imaging*, 33(1), 013021-013021.
- [2] Masahiko SAEKI, Masataka IMURA, Yoshihiro YASUMURO, Yoshitsugu MANABE, and Kunihiro CHIHARA. Redering of Structural Color Using Texture Expression of Optical Path Differences.
- [3] B.Gralak, G.Tayeb, and S.Enoch. Morpho butterflies wings color modeled with lamellar grating theory. *Optics Express*, Vol. 9, No. 11, pp. 576-578, 2001.

機械学習を用いた離散不純物による MOSFET 閾値電圧ばらつきの統計的な解析

Statistic prediction of threshold voltage variations of MOSFET
caused by discrete impurities by machine learning

アイクリスタル¹, 名大院工², 名大未来研³

○関 翔太^{1,2}, 長田 圭一¹, 高石 将輝¹, 笠原 亮太郎^{1,2}, 沓掛 健太郎^{2,3}, 宇治原 徹^{1,2,3}

Aixtal¹, Nagoya Univ.², IMASS Nagoya Univ.³

○Shota Seki^{1,2}, Keiichi Osada¹, Masaki Takaishi¹, Ryotaro Kasahara^{1,2},

Kentaro Kutsukake^{2,3}, Toru Ujihara^{1,2,3}

E-mail: s.seki@unno.material.nagoya-u.ac.jp

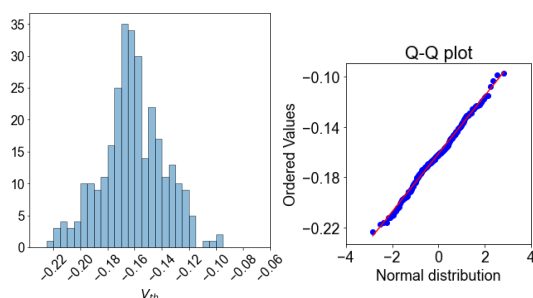
【緒言】半導体デバイスの微細化により、離散的な不純物ばらつきがデバイス特性ばらつきの要因となっている [1]。ばらつきの統計的な予測を行うには様々な離散不純物配置での計算が大量に必要となる。本研究では機械学習により MOSFET のドリフト拡散 3D シミュレーションを高速化して大量の離散不純物配置で閾値電圧を予測し、ばらつきの統計的な考察を行なった。

【方法】ゲート長 50 nm の MOSFET のチャネル領域に離散不純物をポアソン分布から 500 通りランダムに生成した。各分布でゲート電圧 V_g を 11 通り振ったドリフト拡散シミュレーションを実行し、ポテンシャル分布とドレイン電流 I_d を算出した。離散不純物モデルは Cloud-in-cell 法を用いた。それらを教師データとして、離散不純物分布と V_g を入力とし、ポテンシャル分布と I_d を予測する機械学習モデルを構築した。これにより、ある離散不純物分布における $I_d - V_g$ 曲線が求まり、閾値電圧 V_{th} を算出できる。作成した機械学習モデルを用いて、13,000 通りの離散不純物分布から V_{th} の予測を行い統計量の算出や外れ値の構造を抽出した。

【結果と考察】テストデータに対する V_{th} の予測の RMSE は 0.0078 V であり、高精度な機械学習モデルを構築できた。1 条件の計算時間はシミュレーションで約 65 s、機械学習で約 0.04 s であった。図 1 に、(a)シミュレーションによる 300 点計算と(b)機械学習による 13,000 点予測の V_{th} のヒストグラムと分布の正規性の評価のための Q-Q プロットを示す。シミュレーションによる 300 点計算では Q-Q プロットは直線に乗り正規分布で近似できる。一方、機械学習による 13,000 点の大量予測では正規分布からのズレが見られ、 V_{th} が負に大きく外れる確率の低下が確認された。確率密度推定によると、 $+4\sigma$ の $V_{th} = -0.073$ V の 0.0067 % に対し、 -4σ の $V_{th} = -0.241$ V は 2×10^{-12} % でほぼ 0 となった。Sano らにより離散不純物による V_{th} の下振れには下限が存在し、正規分布からズレることが示されており、機械学習による大量予測によってこれを再現できたといえる。また、300 点計算では得られなかった $+4\sigma$ 以上の外れ値も機械学習による 13,000 点計算では観測され、このようなこのよう大量評価によって初めて見つかる離散不純物分布やポテンシャル分布を解析することでばらつきを低減するデバイス構造やプロセス開発につながると思われる。

【謝辞】本研究はソニーセミコンダクタソリューションズの蜂谷涼太氏、趙榮貴氏、小町潤氏に多大なるご支援を頂きました。

(a) 300 points calculation by the simulation



(b) 13,000 points calculation by the ML model

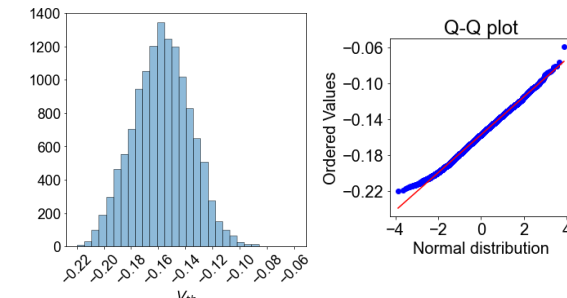


Fig.1 Histograms of V_{th} and Q-Q plot for (a) 300 different discrete impurities configurations calculated by drift-diffusion simulations and (b) 13,000 different discrete impurities configurations predicted by machine learning model.

【参考文献】 [1] N. Sano, et al. Materials 11. 12, 2559 (2018).

不規則な櫛歯型構造を設けたナノリボンにおける電界印加による電流スイッチング

Field-induced Current Switching in a Nanoribbon with Random Comb-like Structure

○ 田中 一, 森 伸也 (阪大院工)

○ Hajime Tanaka and Nobuya Mori (Osaka Univ.)

E-mail: tanaka@si.eei.eng.osaka-u.ac.jp

背景 通常の電界効果トランジスタが、電界を印加することでキャリア密度を変調するのとは異なり、電界の印加でキャリアの有効質量や移動度を変調するという原理による電流スイッチングがこれまでに提案されている [1, 2, 3]. 本研究では、不規則性を持つ櫛歯型構造を設けたナノリボンにおける、幅方向の電界の印加による導電性の変調について、非平衡グリーン関数 (NEGF) 法によるシミュレーションを行い、急峻なスイッチングの可能性を検討した。

計算モデル 幅 W のナノリボンの片側端部に櫛歯型構造を設けた、図 1 に示すような構造を考えた。ソース電極のフェルミ準位 E_F を 0 eV とした。長さ L のチャンネル部には、2次元系としての伝導帯下端 $E_C = 0.3\text{ eV}$ を基準として、櫛歯型の構造を定める $+1\text{ eV}$ の障壁 (斜線部) と、2つのゲート TG・BG による電位変化とを加えた。この際、櫛歯部分の各歯の長さを、図 1 に示すように不規則に変化させた。また、水色で示すナノリボン部の内、ゲート TG (BG) で覆われている幅 W_T (W_B) の領域内では、 $E_C = 0.3\text{ eV} - eV_{TG}$ (BG) とした。2つのゲートの間の領域には、電圧差 $V_{TG} - V_{BG}$ に由来する幅 (y) 方向の一定電界 F_y を印加した。系全体をメッシュサイズ 0.5 nm で離散化し、有効質量は $0.1 m_0$ 、温度は 300 K とした。

この系における、バリスティック電流 I_{bal} と、フォノン散乱を考慮した電流 I_{ph} とを、NEGF 法で計算した。 I_{ph} の計算の際には、弾性的な音響フォノン散乱と非弾性的な無極性光学フォノン散乱を、自己無撞着ボルン近似により導入した。散乱強度は、文献 [4] のパラメータを用い、幅 3 nm の量子井戸の基底サブバンドを仮定して求めた。

結果 $V_{TG} = 0\text{ V}$ を一定とし、 V_{BG} として負電圧を印加することで、電界 F_y による導電性の変化を調べた。得られた I_{bal} の F_y 依存性を図 2 に青丸で示す。 F_y の印加により、電流が 2 桁程度増加していることが分かる。これは、 $F_y \approx 0$ では、櫛歯型構造の各歯の領域がサイズの異なる量子ドットのように振る舞い、ドット間のエネルギー準位差により透過確率が低くなるが、 F_y を印加すると、TG 側に電子が引き寄せられてエネルギー準位差が小さくなり、共鳴的に電流が流れることにより説明できる。櫛歯型構造の歯の長さを一様とした場合 (黒), F_y の印加による電流の増加は見られない。

図 3 には、 $V_{BG} = 0\text{ V}$ とし、 V_{TG} に正電圧を印加した場合の、 I_{bal} の V_{TG} 依存性を青丸で示す。 V_{TG} がポテンシャルを変調することによる電子の増加と、 F_y による図 2 と同様の透過確率の増加とが合わさることで、サブスレッショルドスイング (SS) 値が 20 mV/dec 程度という、急峻な電流変化が生じる。さらに、フォノン散乱を考慮した I_{ph} を赤四角で示す。フォノン散乱を考慮すると SS 値は劣化するが、 60 mV/dec 未満の値が維持されている。

[1] H. Sakaki, JJP 21, L381 (1982). [2] Y. Tokura and N. Susa, JAP 67, 2171 (1990).

[3] Y. Ohno and H. Sakaki, SSE 40, 303 (1996). [4] S. Takagi et al., JAP 80, 1567 (1996).

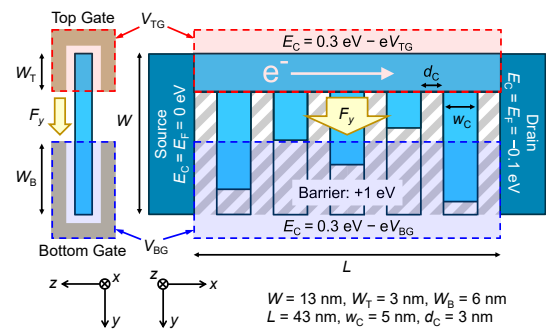


Fig. 1: The schematic picture of the assumed device with comb-like structure.

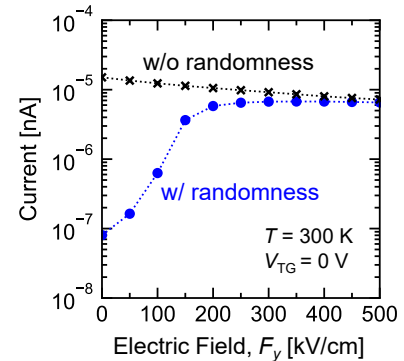


Fig. 2: F_y dependence of I_{bal} in devices with (blue) and without (black) the randomness of the comb-like structures.

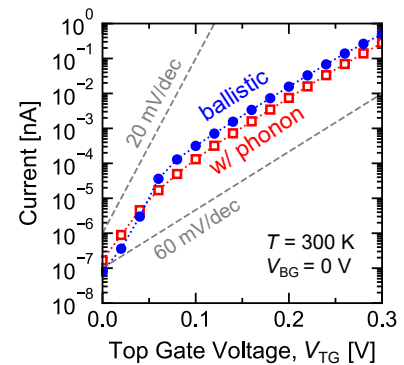


Fig. 3: V_{TG} dependence of I_{bal} (blue) and I_{ph} (red).

半導体ナノシートにおける電子移動度の結晶方位依存性の モンテカルロシミュレーション

Monte Carlo Simulation of Crystallographic Orientation Dependence of Electron Mobility in Semiconductor Nanosheets

阪大院工 ○岡田 丈, 田中 一, 森 伸也

Osaka Univ., ○Jo Okada, Hajime Tanaka, Nobuya Mori

E-mail: {okada, tanaka, mori}@si.eei.eng.osaka-u.ac.jp

モンテカルロ (MC) 法を用いた半導体ナノシート (NS) の電子輸送特性解析では, サブバンド構造・散乱確率を計算し, その結果を用いて, 自由走行・散乱過程を模擬する. その際, 通常, 自由走行時にサブバンド指数は変化しないと仮定する. しかし, 有効質量の非対角成分 (ODEM) が有限の値を持つ場合, ODEM 誘起サブバンド間遷移のため, この仮定が成り立たない [1]. そのため, 任意の結晶方位を持つ NS の電子輸送特性を解析する場合には注意が必要である. 本研究では, ODEM 誘起サブバンド間遷移が NS の電子移動度に与える影響を MC 法を用いて調べた.

Fig. 1 に示したような, $(0\bar{1}1)$ 面上の, $[\bar{2}11]$ チャネルの n-Si NS を考えた. x 方向を輸送方向とし, y 方向, z 方向の閉じ込め幅をそれぞれ, W_y , W_z とした. $[100]$ 谷の電子を考慮し, 無限井戸形ポテンシャルを仮定した. Fig. 2 の黒点線にサブバンド構造 $E_n(k)$ を示す. ODEM 誘起サブバンド間遷移の影響を調べるため, Krieger-Iafrate (KI) 方程式 [2] を用いて, 電子の存在確率 $|a_n(k(t))|^2$ の時間発展を調べた. 初期値として $|a_1(k(0))|^2 = 1$, $k(0) = 0$ を与え, $|a_n(k(t))|^2$ を数値計算により求めた後, 平均的なエネルギー $\bar{E}(k(t)) = \sum_n |a_n(k(t))|^2 E_n(k(t))$ を計算した. 結果を Fig. 2 の実線に示す. 自由走行中に基底サブバンドの電子の存在確率が減少し, 励起サブバンドの電子の存在確率が増加していることがわかる. 次に, MC 法を用いて, 電子移動度を計算した. 自由走行時に KI 方程式を解くことで, 電子の存在確率 $|a_n(k(t))|^2$ を計算し, サブバンド間遷移を取り入れた [3]. Fig. 3 にサブバンド間遷移を考慮した場合の結果を赤印で, 考慮しなかった場合の結果を黒印で示す. W_y が小さい場合, 両者は一致しているが, W_y が大きくなるにつれて, サブバンド間遷移を考慮した場合のほうが移動度が高くなることがわかった.

[1] N. Mori *et al*, submitted for publication. [2] J. B. Krieger and G.J. Iafrate, Phys. Rev. B, **33**, 5494 (1986). [3] R. Hathwar *et al*, J. Appl. Phys. **120**, 044307 (2016).

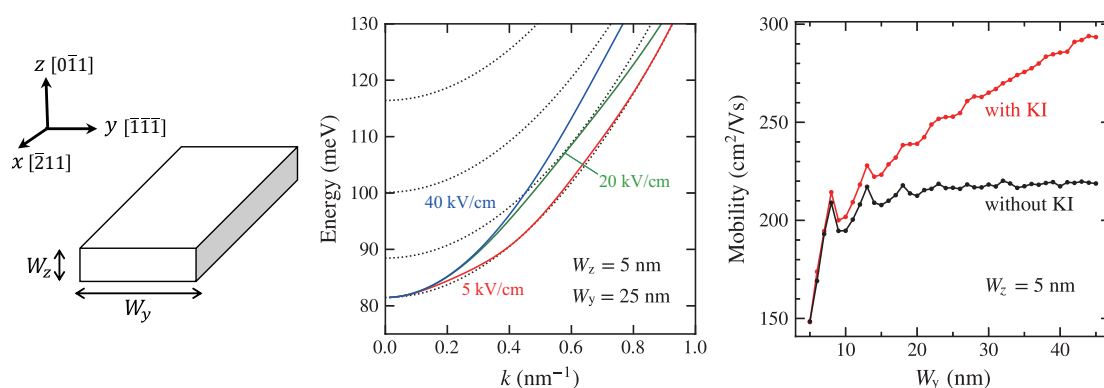


Fig. 1 [left] Schematic diagram of n-Si nanosheet. **Fig. 2** [center] Subband structure of the n-Si nanosheet (dotted lines). Solid lines represent $\bar{E}(k(t))$ for $F = 5, 20, 40 \text{ kV/cm}$. **Fig. 3** [right] Mobility as a function of W_z with (without) the ODEM-induced subband transitions shown by the red (black) marks.