

原子論的計算に基づく Ru のサイズ効果の解析 Atomistic Simulation Based Analysis of Size Effect of Ru

慶大理工 ○田中 貴久

Keio Univ., °Takahisa Tanaka

E-mail: tanaka@elec.keio.ac.jp

近年、LSIの配線材料としてRuが注目されている。Ruは電子の平均自由行程がCuよりも短く、微細な配線ではCuよりも電気抵抗率のサイズ効果を抑制し、低い電気抵抗を実現できると予想される。電気抵抗率のサイズ効果は表面や粒界での電子散乱に起因する。そして表面での電子散乱は吸着物や表面粗さに依存する。従来、表面での電子散乱の寄与は Fuchs-Sondheimer (FS) モデルに含まれる鏡面性パラメータ p で記述されており、LSI配線では完全に拡散的な表面散乱を意味する $p=0$ が経験的に用いられてきた。この鏡面性パラメータを数値計算で解析可能になれば、FSモデルにより様々な形状・表面のRu配線の電気抵抗を予測できる。

本研究では、表面散乱への寄与が大きいと考えられる酸素が吸着した場合の鏡面性パラメータを解析するため、1) Ru/O 反応力場を構築し、2) 反応力場分子動力学計算と密度汎関数法に基づく非平衡グリーン関数計算(DFT/NEGF)により電気抵抗率を求めた [1]。1)に関して Quantum Espressoの結果を参照データとしてLAMMPSによる反応力場分子動力学計算の結果をフィッティングして反応力場のパラメータを決定した。2)では構築した反応力場を用いて、hcp構造の(0001)面に酸素吸着したRuナノシートもしくは清浄表面を持つRuナノシートの室温における原子変位を分子動力学計算から求めた。原子変位を含む構造の両端に半無限電極を設定し、電極間の透過率を計算することで、フォノンや吸着物による散乱を含んだ電気抵抗率が計算可能である [1]。酸素吸着時の表面としては、実験的に報告例がある被覆率50%のO(2x1)構造を仮定した [2]。

Figure 1はRuナノシートの電気抵抗率のサイズ効果を示している。本研究で計算した清浄表面Ruナノシートの電気抵抗率は、完全に鏡面的な散乱を仮定した場合の半古典的に拡張されたFSモデルから得られる電気抵抗率と良い一致を示しており [3]、妥当な結果が得られている。また、O(2x1)構造をもつ酸素吸着Ru表面では鏡面性パラメータ $p=0.67$ が得られ、従来仮定されてきた $p=0$ の場合よりも低い電気抵抗率を示すことが明らかになった。

本研究の手法を酸素吸着だけでなく様々な酸化状態のRuに適用することでより実用的な配線構造のRuについても電気抵抗率を計算できると予想される。

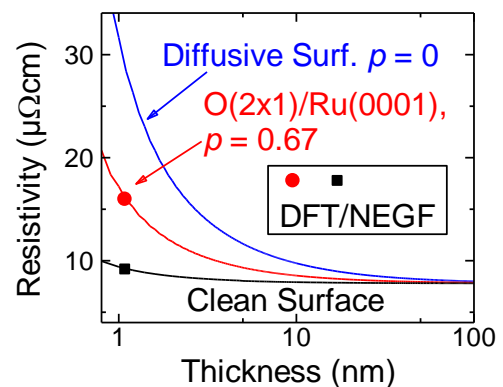


Fig.1 Thickness dependence of the resistivity of Ru nanosheets. Lines were derived from the semi-classical model in Ref. [3].

参考文献[1] T. Tanaka *et al.*, IEEE Elec. Dev. Lett. **42**, 1057

(2021).[2] S. Maier *et al.*, Phys. Rev. B **82**, 075421 (2010).

[3] T. Zhou and D. Gall, Phys. Rev. B **97**, 165406 (2018).