

## 微小欠陥による金属不純物のゲッターリングに関する第一原理解析

### First-Principles Analysis on Gettering of Metallic Impurities by Microscopic Defects

岡山県立大学大学院情報系工学研究科<sup>1</sup>, グローバルウェーハズ・ジャパン株式会社<sup>2</sup>

○前田 貴弘<sup>1,2</sup>, 末岡 浩治<sup>1</sup>, 泉妻 宏治<sup>2</sup>

Okayama Pref. Univ., Dept. of System Engineering<sup>1</sup>, GlobalWafers Japan Co., Ltd.<sup>2</sup>

○Takahiro Maeta<sup>1,2</sup>, Koji Sueoka<sup>1</sup>, Koji Izunome<sup>2</sup>

E-mail: Takahiro\_Maeta@sas-globalwafers.co.jp

LSI の微細化により、重金属汚染がデバイスの歩留まりや信頼性に与える影響が大きくなっている。そのため、デバイス活性領域の重金属汚染を除去するゲッターリング技術がより重要になっており、デバイス製造では、BMD(Bulk Micro Defect)によるインターナルゲッターリング(IG)技術を適用したシリコンウェーハを用いることが主流である。しかし、従来の技術だけではゲッターリング能力は十分とは言えず、よりゲッターリング能力を高めたウェーハの開発が進められている<sup>[1]</sup>。そこで、本研究では、IG に用いられていない実体観測が困難なサイズの微小欠陥による金属不純物のゲッターリング能力を第一原理計算法により解析した。

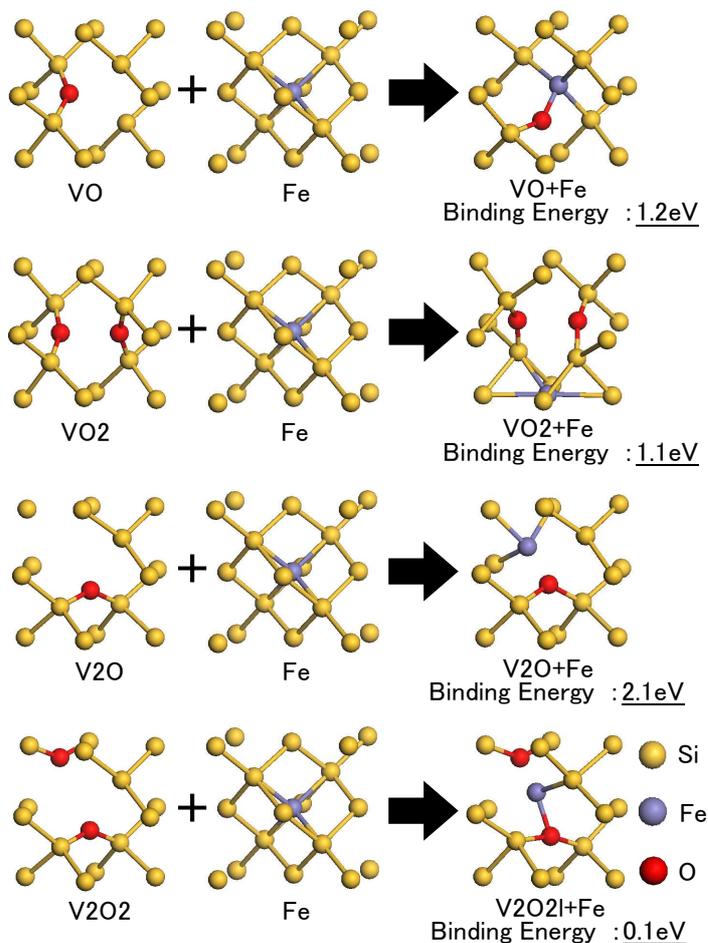


Fig.1 Gettering of Iron by VmOn Defect

本計算では、BMD の基となる原子空孔(V)と酸素(O)から成る  $V_mO_n$  ( $m=1\sim 2, n=1\sim 2$ ) 欠陥を考慮した。Fe(鉄)に対する結合エネルギーの計算結果を図 1 に示す。各種モデルにおいて、複数種の原子の配置を計算し、最も安定な構造を結合エネルギーの計算に用いた。結合エネルギーが大きいほど結合しやすい、つまり、微小欠陥が Fe をゲッターリングできることを示す。計算結果から、VO, VO<sub>2</sub>, V<sub>2</sub>O 欠陥と Fe の結合エネルギーは大きく、ゲッターリングできるが、V<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 欠陥と Fe は結合エネルギーが小さく、ゲッターリングできないことが分かる。この結果から、微小欠陥でも金属に対して十分なゲッターリング能力を有することがわかった。

[1] 例えば、表秀一ら、特開 2011-253978