

# 酸素雰囲気下における下地元素の膜表面への偏析予測法 Method for Predicting Surface Segregation Under Oxygen Atmosphere

物材機構<sup>1</sup> ○吉武 道子<sup>1</sup>

National Inst. Materials Sci.,<sup>1</sup> ○Michiko Yoshitake<sup>1</sup>

E-mail: yoshitake.michiko@nims.go.jp

## 1. はじめに

材料中の微量不純物の表面への濃縮、積層膜において下地元素が膜表面に現れる現象(偏析現象)は、材料・デバイス作製において頻繁に見られる現象である。これらの偏析現象は原子の拡散を伴っているが、偏析が起こるかどうかは拡散係数の大小とは必ずしも関係なく、材料に含まれる元素に依存している。先に、このような偏析現象が起こるメカニズムを考察し、それに基づいて偏析の有無を予測する方法を開発した。そして、物質・材料研究機構のデータベース MatNavi のアプリケーションシステムの一つ、金属偏析予測システム SurfSeg ソフトとして 2009 年 4 月より公開している (2011 年のユーザー数 220 余り)。今回、ユーザーから要望があった、酸素雰囲気下における偏析へと予測方法を拡張した[1]。

## 2. 予測方法

今回扱う偏析は図 1 の a) に示した状態で、下地の金属原子の粒界拡散が体拡散よりも早く起こることに起因する準安定状態を扱っている。

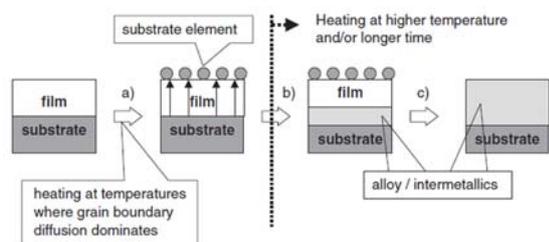


図 1 膜/基板における熱拡散に伴う変化の様態

次に、偏析の有無を予測するために、以下のような考察を行った。基板と粒界のある膜との界面を模式的に示したのが図 2 左図で、基板の原子は熱励起されてある確率で必ず膜粒界に吸着する。このときに膜粒界に吸着した状態の方が安定なら、この原子は基板に戻らずに (濃度勾配に従って) 膜表面へと輸送され、膜表面に偏析する。一方、

膜粒界に吸着するよりも基板に戻った方がエネルギー的に安定ならば、原子は基板側に戻り、基板元素は膜表面へ輸送されず、偏析は観測されない。すなわち、図 2 の右図に示したように、基板原子が膜材料あるいは基板材料のどちらに吸着するのがエネルギー的に安定かによって偏析の有無が決まると考え、予測を行っている。

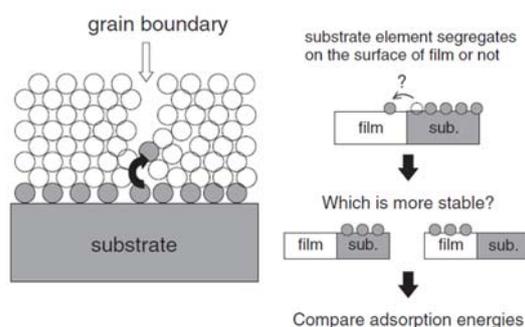


図 2 基板原子が膜粒界に吸着する模式図(左図)と、基板原子の吸着による安定化の有無による偏析の予測スキーム

今回、これに酸素雰囲気下という条件を付加するために、図 3 の模式図のように酸素の吸着により基板原子 A の膜 B 上への偏析が影響される効果を取り入れ、図 4 の判定アルゴリズムを開発した。

[1] M. Yoshitake, Jpn. J. Appl. Phys. 51 (2012) 085601.,

<http://surfseg.nims.go.jp/>

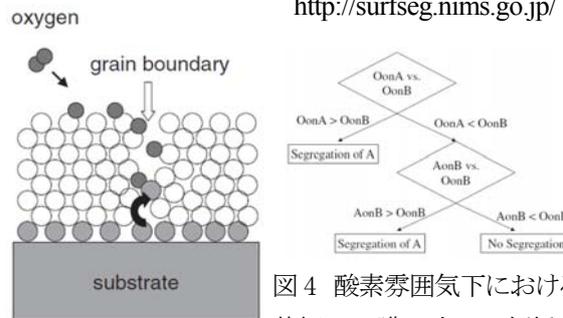


図 3 酸素雰囲気下における基板原子 A の膜 B 上への偏析の有無を判定するアルゴリズム (OonA, OonB は A 上、B 上の膜粒界への吸着の酸素の吸着エネルギー)