

Si酸化膜とSi窒化膜中における金属原子の安定性に関する第一原理解析

Ab initio analysis on the stability of metal atoms in silicon oxide and silicon nitride

岡山県立大院¹ ○柴田大生¹, 小林駿介¹, 末岡浩治¹

Okayama Pref. Univ.¹ ○Daiki Shibata¹, Syunsuke Kobayashi¹, Koji Sueoka¹

E-mail: shibata2129@gmail.com

【緒言】 LSIの製造工程において、意図しない金属汚染はLSIの信頼性に悪影響を与える。ゲート絶縁膜や層間絶縁膜にはSi酸化膜が用いられており、イオン注入のスルー膜やストレスライナー膜などにはSi窒化膜が用いられている。我々はSi酸化膜/Si基板構造とSi窒化膜/Si基板構造における金属原子の挙動の比較と説明を目的としており、これまで、Si窒化膜/Si基板構造における金属原子の挙動について報告してきた¹⁾。今回は、SiO₂バルクとβ-Si₃N₄バルクモデルを使用して、Si酸化膜中とSi窒化膜中における金属原子 (Cr, Ni, Cu, W) の安定性に関する第一原理解析を行った。得られた結果について、金属種依存性や膜種依存性に注目して考察した。

【計算方法】 Si酸化膜としてα-quartz結晶を、Si窒化膜としてβ-Si₃N₄結晶を仮定して計算を行った。これらの計算モデルを図1に示す。SiO₂バルクモデルはSi原子24個とO原子48個で構成されており、β-Si₃N₄バルクモデルはSi原子18個とN原子24個で構成されている。SiO₂バルクモデルでは6か所の、β-Si₃N₄バルクモデルでは5か所の格子間位置に金属原子を配置して構造最適化を行い、最安定位置の形成エネルギー値から金属原子の安定性を評価した。

【形成エネルギーの計算結果】 図2にSi酸化膜とSi窒化膜中における金属原子の形成エネルギーを示す。これより、Si酸化膜中とSi窒化膜中のいずれにおいてもNi原子の形成エネルギーが最も低いことがわかる。また、いずれの膜中においても金属原子の形成エネルギーはNi < Cu < Cr < Wの順番となっている。なお、当日はSi酸化膜/Si基板構造における金属原子の安定性についての計算結果を示すとともに、前回報告したSi窒化膜/Si基板構造との比較も行う。

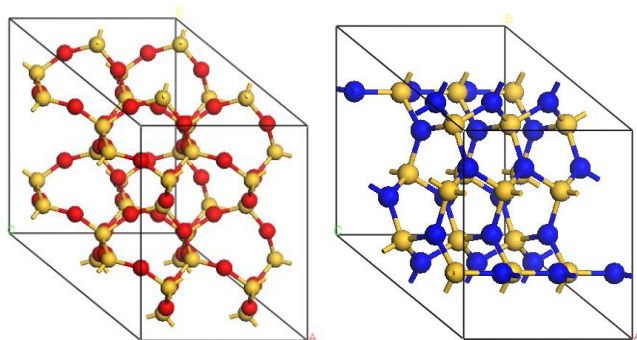


Fig.1 SiO₂ (left) and β-Si₃N₄ (right) bulk models

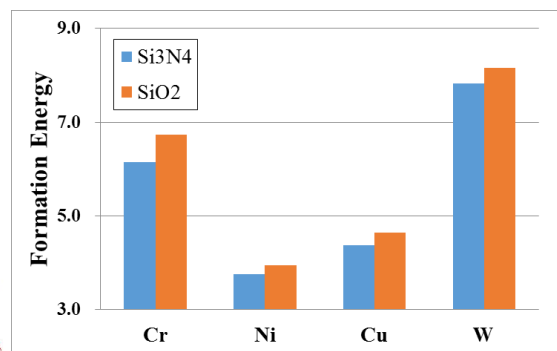


Fig.2 Formation Energy of metal in SiO₂ and β-Si₃N₄

【参考文献】 1) 柴田大生, 第61回応用物理学会春季学術講演会 (2014), 19p-D9-1.