

19p-D9-1

β -Si₃N₄/Si 界面構造のモデル化と金属原子の 安定性に関する第一原理解析

Ab initio analysis on the stability of metal atoms in β -Si₃N₄/Si structure

岡山県立大院¹, ソニー株式会社² 柴田大生¹, 小林駿介¹, 末岡浩治¹, 小町 潤², 嵯峨幸一郎²

Okayama Pref. Univ.¹, Sony Corporation² Daiki Shibata¹, Syunsuke Kobayashi¹, Koji Sueoka¹,

Jun Komachi², and Koichiro Saga²

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きたが、より絶縁性や耐蝕性に優れたSi窒化膜が検討されている。しかしながら、Si酸化膜と比較して、Si窒化膜中の不純物金属原子の挙動は十分に理解されていない。そこで本研究では、 β -Si₃N₄/Si界面構造のモデル化を試み、さらにこの構造におけるFe, Cr, Ni, Cu, W原子の安定性に関する第一原理解析を行った。

【界面モデルと計算方法】8種類の β -Si₃N₄/Si界面モデルについて構造最適化を行い、全エネルギーを比較した。その結果、図1に示すSi原子（黄色）96個、N原子（青色）56個からなる安定な界面モデルを得た。さらに、図1に水色で示す6つの格子間位置（左から3rd, 2nd, 1st, interface, 1st, 2nd）に金属原子を配置して構造最適化を行い、各位置の形成エネルギー値から界面近傍における金属原子の安定性を評価した。なお、界面から十分に離れたSi中についてはSiバルクモデルで近似し、界面から十分に離れたSiN中については β -Si₃N₄バルクモデルで近似して計算した。

【形成エネルギーの計算結果】図2に β -Si₃N₄/Si界面近傍における形成エネルギーを示す。横軸は原子配置を表しており、bulk-SiはSi中のTサイトにおける、bulk- β -Si₃N₄は β -Si₃N₄中の十二員環中心付近における形成エネルギー値である。これより、いずれの金属もSi中の方がSiN中より安定であることや、界面近傍が最も形成エネルギーが低く、界面近傍でトラップされることがわかる。さらに金属を個別に見ると、W > Cr, Fe > Cu, Niの順でSi₃N₄/Si構造に入りにくいことがわかる。また、W, Fe, Crは界面から1層目のSi中が、Ni, Cuは界面が最も安定である。なお、本講演会において小林¹⁾が、Si窒化膜表面近傍を含めた計算結果および金属汚染実験²⁾との比較について発表する。

【参考文献】1. 小林他, 本講演会, 2. 上野他, 第60回応物春季学術講演会 (2013), 28p-G8-8,

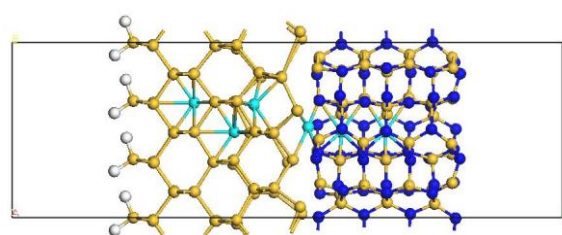


Fig.1 β -Si₃N₄/Si model obtained in the present study

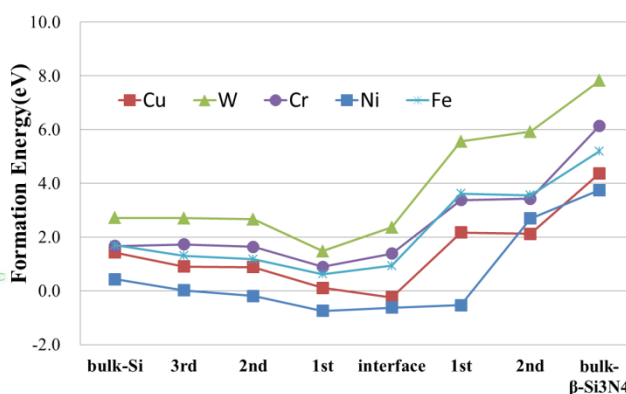


Fig.2 Calculated formation energies of each metal