

Si 窒化膜表面近傍における不純物金属原子の 安定性に関する第一原理解析

First-principles analysis on stability of contamination metal atoms in β - Si_3N_4 surface

岡山県立大学大学院情報系工学研究科¹, ソニー株式会社²

○小林駿介¹, 柴田大生¹, 末岡浩治¹, 小町潤², 嵯峨幸一郎²

Okayama Pref. Univ., Dept. of System Engineering¹, Sony Corporation²

○S. Kobayashi¹, D. Shibata¹, K. Sueoka¹, J. Komachi² and K. Saga²

E-mail: ca24010b@c.oka-pu.ac.jp

【緒言】LSI 製造プロセスにおける不純物金属汚染はゲート絶縁膜の信頼性に影響したり、接合リーク電流の増大を引き起こすことが知られている。我々は、すでに β - Si_3N_4 バルク中における不純物金属の拡散機構に関する第一原理解析を報告した^[1]。今回、不純物金属原子が Si 窒化膜表面から内方拡散することから β - Si_3N_4 表面モデルを作成し、表面近傍における金属原子の安定性に関する第一原理計算解析を行った。さらに実験^[2]との比較も行ったので報告する。

【計算方法】 β - Si_3N_4 バルク結晶から、図 1 に示すような Si 原子 (黄色) 18 個, N 原子 (青色) 24 個を含む表面モデルを作成した。ここで、表面垂直方向に 1 nm 厚さの真空スラブを設け、最下層の Si と N 原子のダングリングボンドを H 原子で終端している。この β - Si_3N_4 表面モデルの深さ方向に Fe, Cr, Ni, Cu, W を配置し、構造最適化して全エネルギーを求めた。図 1 には最安定位置の Fe 原子 (水色) も示してある。計算には汎用第一原理計算ソフト CASTEP を使用した。

【結果】図 2 に β - Si_3N_4 表面近傍と β - Si_3N_4 バルク中の金属原子の形成エネルギーを示す。これより、計算した全ての金属について、 Si_3N_4 バルク中よりも Si_3N_4 表面における形成エネルギーが低い、すなわち Si_3N_4 表面は金属原子のトラップサイトとなっていることがわかる。とくに、Fe, Ni, Cu は Cr, W と比較して Si_3N_4 表面で安定である。柴田ら^[2]の計算結果も考慮すると、これらの 5 種類の金属の挙動は次のように整理できる。

Fe : Si 窒化膜表面にトラップされやすく, SiN/Si 構造へ入りにくい。

Cu, Ni : Si 窒化膜表面にトラップされやすく, SiN/Si 構造へ入りやすい。

Cr, W : Si 窒化膜表面にトラップされにくく, SiN/Si 構造へ入りにくい

Si 窒化膜表面における金属原子のトラップされやすさは、イオン注入でのノックオンされやすさにも関係すると考えられる。以上の計算結果をもとに、上野らにより報告されている金属汚染実験^[3]の説明も行う。

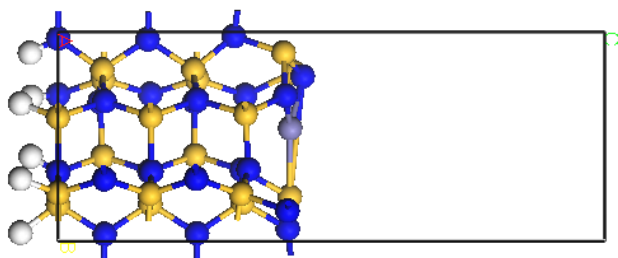


Fig.1 β - Si_3N_4 surface model obtained in the present study

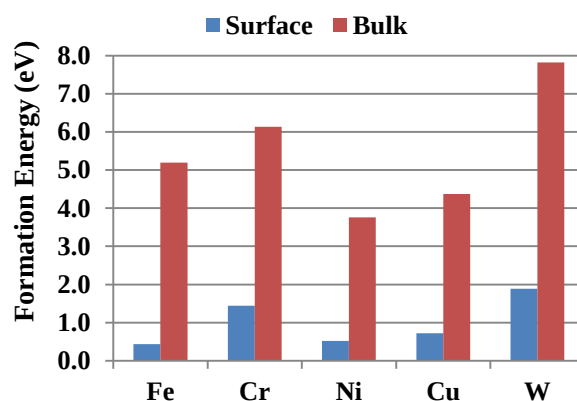


Fig.2 Calculated formation energies

[1]小林他, 第 60 回応物春季学術講演会 (2013), 28p-G8-9 [2] 柴田他, 本講演会

[3]上野他, 第 60 回応物春季学術講演会 (2013), 28p-G8-8