

Si ウェーハ中のゲッターリング現象に関する熱統計モデリング

Thermo-statistical modeling for getterings in a silicon wafer

¹岡山県立大 情報工, ²グローバルウェーハズ・ジャパン(株) 神山 栄治^{1,2}, [○]末岡 浩治¹

¹Okayama Pref. Univ., ²GlobalWafers Japan Co., Ltd., Eiji Kamiyama^{1,2}, [○]Koji Sueoka¹

E-mail: ejkamiyama@aol.com

Si ウェーハ中のゲッターリングについては、その重要性から非常に多くの実験報告がなされている。また、そのメカニズムとして偏析型と緩和型が提案され、Si ウェーハ表面や内部における金属の熱平衡濃度やゲッターリングサイトとの結合エネルギーを考慮した、連続体モデルによる解析が一般的に行われている。これに対し、我々は前回、原子配置の自動算出プログラムを用いることでゲッターリングサイト (B) とその周囲の独立な格子間位置の数、さらにその各位置における B と金属 (Fe) の結合エネルギーを第一原理計算により求め、その結果を統計力学的に取扱うことで、B 周囲において Fe の熱平衡濃度がどの程度上昇するかを見積もった[1]。

今回我々は、Si ウェーハ中のゲッターリング現象を理論的に扱う手法として、次のような熱統計モデルを提案する[2]。本モデルでは、扱う金属原子の濃度の代わりに、その原子の取りうるサイト種 i の結合エネルギー E_b^i と、各サイト数 N^i を用いる。そして、次式の分配関数 Z により、熱平衡状態における各サイト i における金属原子の存在確率を求める。

$$Z = \sum_i N^i \exp \left[-\frac{E_b^i}{k_B T} \right].$$

この式は系全体で金属原子数が保存された正準集団についての式であり、

[A] Δ_i で扱うサイトとしてウェーハ表面やデバイス膜中/界面、さらに Si 結晶内の拡散経路の準安定サイトなど、必要なサイトを考慮できる、

[B] E_b^i のエネルギー原点は、 Δ_i に含まれるすべてのサイトで統一すれば任意で良い、という自由度がある。

本モデルを B ドープサブの P/P⁺エピウェーハにおける Cu ゲッターリングに適用した。ウェーハ表面にも Cu が捕獲しうるサイトを仮定することで、図 1 のように、各サブ厚のエピウェーハにおける Cu のゲッターリング効率において、実験と良い一致を得た[2]。

ゲッターリング現象における金属原子は、通常、実験・理論共に「濃度」で記述されている。一方、本モデルでは熱平衡状態が対象であり、各サイトにおける金属の存在確率を求める。また、本モデルにより算出される各サイトの平衡濃度は上記[A]に関わり、 Δ_i として考える系に依存して変化する。

ところで、ゲッターリング機構の解明やゲッターリングサイトの設計ツールとして、第一原理計算が期待されている[3]。本報告の計算結果は特別なものではないが、今後はより実際的な問題にも対応できるように、第一原理計算を用いた本熱統計モデルの改良を進める。

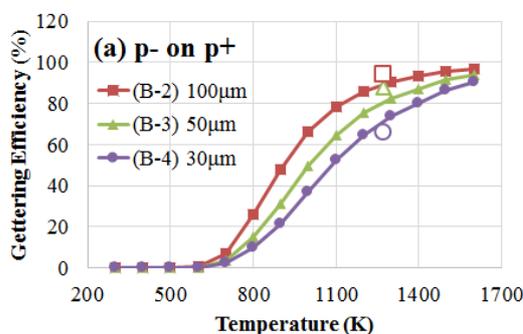


図1 Cu ゲッターリング効率 (実線: 計算、白抜き点: 実験) [2]

参考文献

[1] 末岡浩治他, 第 62 回応用物理学会春季学術講演会, 12p-A18-18 (2015).

[2] E. Kamiyama et al., ECS J. Solid State Science and Technology, **4**, 232 (2015).

[3] 宝来正隆「シリコン結晶技術」4.8 節 (学振第 145 委員会、技術の伝承プロジェクト編) (2015).