

SiO₂/Si構造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 SiO₂/Si structure

岡山県立大院情報系工 〇柴田大生, 小林駿介, 末岡浩治

Okayama Pref. Univ., 〇Daiki Shibata, Syunsuke Kobayashi, Koji Sueoka.

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。そのため、Si基板中の金属の拡散挙動やゲッタリングに関して多くの研究[1]が行われているが、ゲート絶縁膜等に用いられるSi酸化膜を含むSiO₂/Si構造中の金属原子の挙動については実験も少なく[2]、十分に理解されていない。そこで本研究では、SiO₂/Si構造における金属原子(Fe, Cr, Ni, Cu, W)の形成エネルギーを第一原理計算により評価した。さらに計算結果をもとに、どの金属がこの構造に取り込まれやすいのかなどを考察した。

【界面モデルと計算方法】Yamasakiらの論文[3]を参考にして、Si原子100個とO原子60個で構成されるSiO₂/Si界面モデルを作成した。さらにこのモデルを構造最適化することで、図1に示す安定な界面構造を得た。この図において、Si原子を黄色、O原子を赤色で示している。さらに、図1に水色で示す5つの格子間位置(左から2nd, 1st, interface, 1st, 2nd)に金属原子を配置して構造最適化を行い、各位置における金属原子の形成エネルギーを評価した。なお、界面から十分に離れたSi基板中についてはSiバルクモデルで近似し、界面から十分に離れたSiO₂中についてはα-quartz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、SiO₂/Si構造中における金属原子の形成エネルギーをそれぞれ示す。横軸は原子配置を表している。これより、いずれの金属原子もSiO₂中よりもSi中のほうが安定であることがわかる。また、金属原子の形成エネルギーはおおよそNi < Cu < Fe < Cr < Wと整理できる。すなわち、NiやCuはこの構造中に入りやすく、WやCrは入りにくいと考えられる。この結果は、原子半径が大きい金属ほどSiO₂/Si構造中の格子間位置を拡散しにくいと考えれば理解しやすい。また、SiO₂/Si界面近傍において金属原子の形成エネルギーが低く、金属原子は界面近傍でトラップされることもわかる。さらに、原子半径の大きな金属原子(W, Cr, Fe)は界面よりSi側に1層入った位置が安定であることもわかる。現在、SiO₂表面に関する計算や拡散障壁の計算も行っており、当日はこれらも含めて報告する。

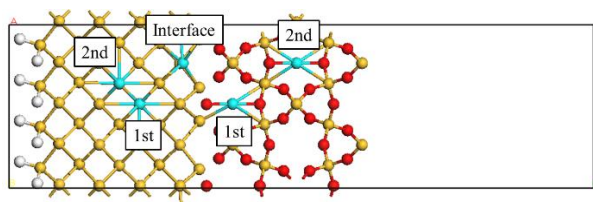


Fig.1 Most stable SiO₂/Si structure.

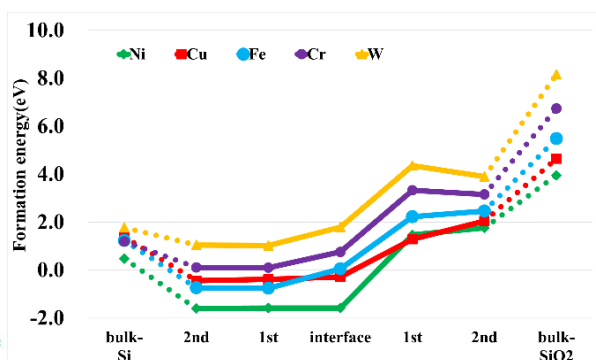


Fig.2 Formation energy of metal atoms in SiO₂/Si.

【参考文献】

1. K. Sueoka *et al.*, Advances in Materials Science and Engineering **Vol. 2009**, Article ID 309209.
2. K. Saga *et al.*, ECS Transactions **25** (5), 375-381 (2009).
3. T. Yamasaki *et al.*, Phys. Rev. B **63**,115314 (2001).