

電荷移動型分子動力学法により作成した Si/SiO₂ 界面構造の評価

Evaluation of Si/SiO₂ interface structure obtained by charge-transfer type molecular dynamics

○高本 聡¹, 山崎 隆浩^{2,3}, 大野 隆央^{2,3,4}, 金田 千穂子^{3,5}, 泉 聡志¹, 酒井 信介¹

1. 東大工, 2. 物材機構, 3. MARCEED, 4. 東大生産研, 5. 富士通研究所

○So Takamoto¹, Takahiro Yamasaki^{2,3}, Takahisa Ohno^{2,3,4}, Chioko Kaneta^{3,5}, Satoshi Izumi¹ and Shinsuke Sakai¹

1.Univ. of Tokyo, 2.NIMS, 3.MARCEED, 4.IIS, Univ. of Tokyo, 5.Fujitsu Lab.

E-mail: takamoto.so@fml.t.u-tokyo.ac.jp

背景と目的: Si の酸化は、半導体デバイス製造には欠かせないプロセスである。近年、電荷の移動を考慮した古典分子動力学法の発展に伴い、Si の酸化を扱う動力学計算が行われている[1]。本研究では、初期酸化をモデル化したナノ秒オーダーの動力学計算を行う。得られた Si/SiO₂ 界面構造について評価した。

手法: 本研究では Si の酸化プロセス再現のために多数のアモルファス構造等を合わせこんだ電荷移動型ポテンシャル[2]を使用した。Si (100) の表面ダングリングボンドが全て終端された理想初期酸化構造を初期条件とし、真空領域に一定の気圧の範囲で連続的に O₂ 分子を挿入して 1200 K で MD を行った。5 ns 後に Si の表面約 6 層分が酸化された構造が得られた(Fig.1)。

結果と考察: 作成された酸化膜の密度は、アモルファス SiO₂ よりも高く 2.41g/cm³ 程度となった。これは実験から得られた酸化界面の密度分布[3]と良く一致している。また界面の電荷分布をみると、Si¹⁺, Si²⁺, Si³⁺の状態の Si 原子が存在している(Fig. 2)。これらの平均位置をみると Si²⁺, Si³⁺はそれぞれ Si¹⁺から 0.8 Å, 2.6 Å 上部であった。この傾向は実験値[4]と傾向が一致する。

界面付近に存在した Si 原子に注目すると、酸化の過程で Si 原子の一部が表面側へ移動する様子がみられた。また、作成された界面構造について O₂ 分子を取り除いて MD を続けると、ボンドの組み換えにより Si の 3 配位構造(O の欠損とみなせる)が界面から表面側へ移動する

様子がみられた。界面近傍では酸化膜内部より Si-O 間の距離が短く Si-O-Si の角度が小さくなる傾向がみられ、応力の高い様子が確認された。

謝辞: この研究の一部は HPCI 戦略プログラム(分野 4)の支援を受けて行った。

[1] N. Takahashi, et al., Phys. Status Solidi B, Vol. **251**, No. 11, pp. 2169-2178 (2014).

[2] 高本, 他, 第 76 回応物秋季 13a-4C-1 (2015).

[3] N. Awaji, et al., J. of Vacuum Sci. and Tech. A, Vol. **14**, Issue 3, pp. 971-976 (1996).

[4] K. Hirose, et al., Progress in Surface Sci., Vol. **82**, pp. 3-54 (2007).

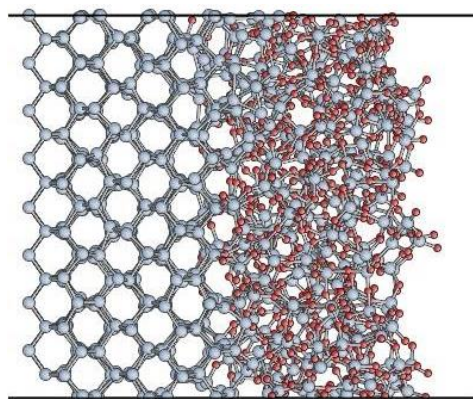


Fig. 1 Si/SiO₂ interface structure obtained by oxidation simulation. Gray atoms: Si. Red atoms: O

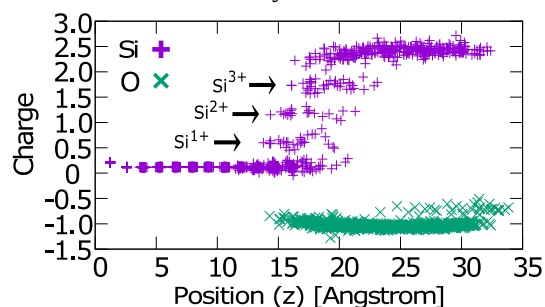


Fig. 2 Charge distribution of the Si/SiO₂ interface.