

Si ウェーハ表面近傍における金属原子の安定性と それに与える酸化膜の影響

Impact of Si (001) surface and SiO₂ film on the stability of metal atoms

岡山県大院情報系工¹, 岡山県大情報工², °野々田 典敬¹, 末岡 浩治²

Graduate School of Engineering, Okayama Pref. Univ.¹, Okayama Pref. Univ.²

°Noriyuki Nonoda¹ and Koji Sueoka²

E-mail: nonoda.opu@gmail.com

VLSIの基板として用いられるSiウェーハにおいて、不純物金属をデバイス製造領域から除去する内部ゲッタリング(IG)技術がより重要になっている。IGの性能は、ウェーハ内部のゲッタリングサイトとSiウェーハ表面との金属原子の競合によって決定される。そのため、IGの性能向上には、Si(001)表面近傍の金属原子の安定性についての理解が必要である。

本研究では第一原理計算法を用い、Siウェーハの(001)表面近傍における12種類(Ti, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Mo, Hf, Ta, W)の金属原子の形成エネルギーを計算した。その結果から表面近傍における金属原子の安定性や熱平衡濃度を評価した。また、極薄酸化膜の存在が今後より重要になるため、この酸化膜が金属原子の形成エネルギーに与える影響についても研究した。

Si原子を64個含み、(001)表面を有する16層の薄膜モデルを作成した。また、表面に1層の酸化膜を含む表面モデルも作成した。これらのモデルの格子間Tetrahedral (T)-siteに金属原子を導入し、第一原理計算法により構造最適化することで全エネルギーを計算した。さらに、その結果から、各層における金属原子の形成エネルギーを算出した。モデルには3次元周期境界条件を課した。

計算結果の例として、Si(001)表面モデルにFe, Ni, Cu原子を導入したときの、各金属の形成エネルギーを図1に示す。

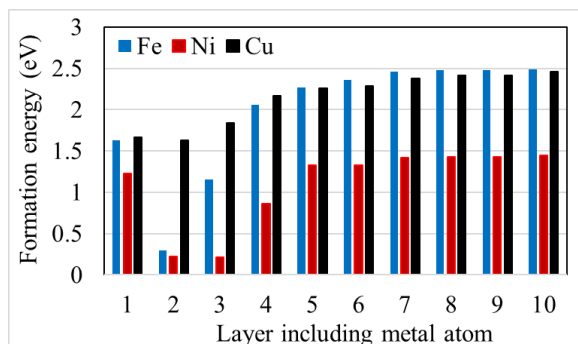


Fig. 1 Formation energy of Fe, Ni and Cu atom in (001) Si surface.

これより、Fe, Ni, Cu原子の形成エネルギーは、いずれも表面付近で減少している。また、5層目以下では形成エネルギーはほぼ一定となり、表面の影響を受けていない。他の金属原子についても同様の結果が得られた。さらに、形成エネルギーとサイト数から、バルク中に対する表面各層における熱平衡濃度を算出した結果を図2に示す。この結果はSiウェーハ中の金属原子の分布を計算する際の有益な基礎データとなる。

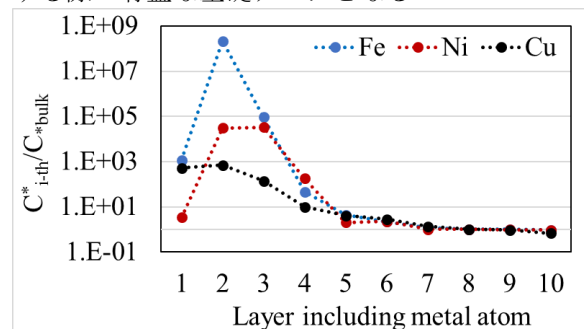


Fig. 2 Ratio of thermal equilibrium concentration at 1000 °C.

最後に、1層の極薄酸化膜が存在する表面モデルにCu原子を導入したときの形成エネルギーを図3に示す。横軸はCu原子を配置した層を示している。これより、酸化膜はその直下数層までのCuの形成エネルギーを上昇させていることがわかる。この結果は、Cu原子の外方拡散が酸化膜の存在により抑制されることを意味している。

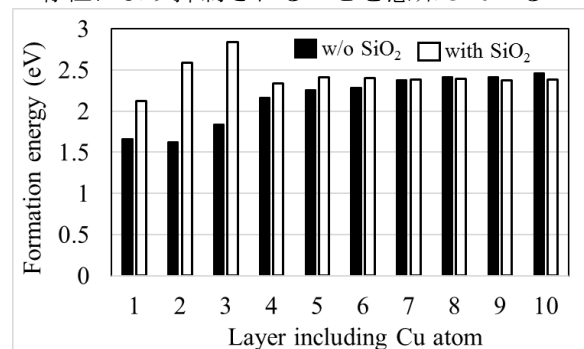


Fig. 3 E_f of Cu atom near mono layer Si oxide film.