Si ウェーハ表面近傍における金属原子の安定性と 拡散障壁に関する第一原理解析

First principles analysis on stability and diffusion barrier of metal atoms

near the Si (001) surface

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

^oNoriyuki 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)表面近傍における金属原子の形成エネル ギーを算出した.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.さら に,隣接する安定サイト間の拡散障壁も計算する ことで,深さ方向の移動経路についても評価した. 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 全エネルギーを求めた.本計算では,電子のスピ ン分極も考慮した.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.

計算結果の例として, Si(001)表面モデルに Fe 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.ここで a₁, a₂などは各層における 独立なサイトを表している.



Fig. 1 Formation energy of Fe atom in (001) Si surface.

これより, Fe 原子の形成エネルギーは, 少なく とも表面から 10 層目までバルクの値よりも減少 しており, 特に 1~4 層目において大きく減少し ている. このことから, 表面の効果は 1~4 層目 において大きく影響していることが分かる. 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 Fe の熱平衡濃度を算出 した結果を図 2 に示す. この結果は Si ウェーハ 中の Fe 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 of Fe at 1000 °C.

最後に, Si 64 原子表面モデルにおける Fe 原子 の拡散障壁を図 3 に示す.これより,5 層目以下 では障壁の値はバルクとほぼ同じであり,表面近 傍の最安定位置に近づくにつれて障壁の値は低 下していることがわかった.



Fig. 3 Diffusion barrier of Fe atom near the Si (001) surface.

なお,極薄酸化膜の影響や他の金属原子につい ての計算結果は,当日報告する.