

「箱庭法」による SiO_2/Si 界面の原子描像

Atomistic picture of SiO_2/Si interface described by Hakoniwa method

¹グローバルウェーハズ・ジャパン(株), ²岡山県立大 情報工 〇神山 栄治^{1, 2}, 末岡 浩治²

¹ GlobalWafers Japan Co., Ltd., ² Okayama Pref. Univ., 〇Eiji Kamiyama¹, Koji Sueoka²

E-mail: ejkamiyama@aol.com

1. はじめに

SiO_2/Si 界面はデバイス中、トランジスタのゲート部や、デバイスのパシベーション・アイソレーション、Si 基板内のゲッタリングサイトとしての BMD (Bulk Micro Defect) など、多岐に渡って活用されている。しかしながら、 SiO_2/Si 界面の原子描像を基にした理論的解析には、これまであまり有効な手段がなかった。この理由として、同界面が様々な手法で形成されることに加え、接合する SiO_2 が Si より柔らかく、界面形成後に大きく変位してアモルファス化しやすいことが挙げられる。本発表では、前報¹で考察した同界面の物性を手掛かりに、 SiO_2/Si 界面近傍における原子レベルの構造を理論的に予測する手法について述べる。

2. 界面反応の進行

Si ウェーハの(001)面の表面酸化進行のメカニズムを考えるために、まず図 1(a)のような Si 結晶と α -Quartz の接合モデル (断面積最小の「理想界面」) を用いる。酸化は Si 側の界面に格子間酸素 O_i が集積することで進行することから、同モデルの界面側の Si-Si ボンドセンターに 6 個の酸素を配置し、更に図 1(b)に示すように、Si 原子を界面から放出したモデルを構造最適化したところ、図 1(c)のような、図 1(a)と同じ「理想界面」が得られた^{1,2}。以上の結果より、この図 1 のモデルは、(001)面の Si 酸化をうまく表現できる接合構造となっていることから、Si 結晶の酸化直後には、 SiO_2 側も同図に示す α -Quartz 構造を有すると推測した。これにより、同界面の反応進行について図 1 をベースとした有限個のモデルで表現でき、 SiO_2/Si 界面反応に箱庭法を適用することが可能となる^{1,2}。

3. 界面構造の推測

前報¹でも述べたように、この SiO_2/Si 界面の反応は、同界面への酸素供給が止まることで停止する。反応が停止した時、界面状態は熱平衡状態にあるとみなすことができる。熱酸化温度などの目的温度 T における、各モデルの存在確率を箱庭法で計算した結果を図 2 に示す。ここで、Si 結晶中の酸素濃度は既知の酸素固溶度³と仮定した。この結果は、 SiO_2/Si 界面に様々な構造が存在しうる (存在確率 $\neq 0$) ことを示しており、各構造に応じた界面特性が発現することが予測される。BMD を用いたゲッタリング実験の報告^{4,5}において、「同じ」 SiO_2/Si 界面間でゲッタリング特性が異なることを示唆するものがあるが、本研究を基にした詳細な解析を進めることで、その理由を明らかにできると考える。

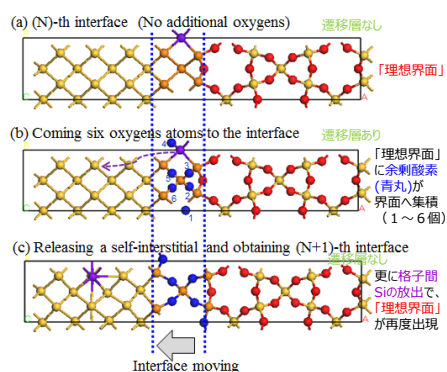


図 1 Si 結晶/ α -Quartz 接合モデル^{1,2}

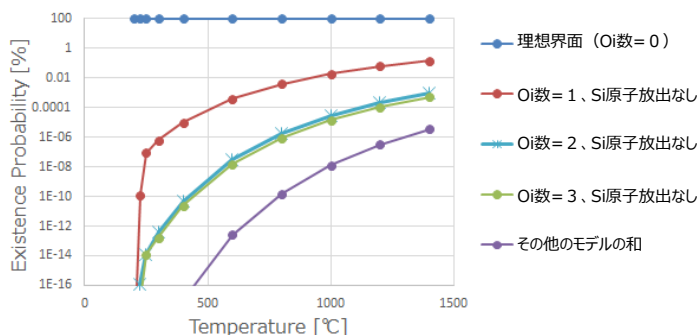


図 2 界面反応進行中に出現する各モデルの存在確率算出例

参考文献

1. E. Kamiyama and K. Sueoka, *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **7**, P102 (2018); 2019 年秋応物 18p-PB4-6.
2. E. Kamiyama and K. Sueoka, *submitted for publication in ECS J. Solid State Sci. Technol.*
3. J. C. Mikkelsen, Jr., *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **59**, 19 (1986).
4. R. Hoelzl, et.al., in *Semiconductor Silicon/2002*.
5. K. Saga and R. Ohno, *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **6**, P231 (2017).