

SiO₂/Si 界面への格子間酸素の一次元整列One-dimensional array of interstitial oxygen atoms onto SiO₂/Si interfaceグローバルウェーハズ・ジャパン¹, 岡山県大情報工² ○神山 栄治^{1, 2}, 末岡 浩治²GlobalWafers Japan Co., Ltd.¹, Okayama Pref. Univ.², °E. Kamiyama^{1, 2}, K. Sueoka²

E-mail: ejkamiyama@aol.com

1. 背景

当グループでは、各種 Si 材料の特性を予測するために、箱庭法を活用することを提案してきた [1]。その活用例の1つとして、SiO₂/Si 界面近傍の Si 結晶側に固溶する格子間酸素の挙動に注目し、酸素固溶度 [2]や界面反応 [3]を記述する方法について検討してきた。

ところで、Si 結晶中における酸素の凝集体では、(1) 酸素が 3 次元的に配列した酸素析出物 (SiO₂) と、(2) 一次元的に整列するサーマルドナー (TD) とが知られる。ここで、この(2)が(1)の近傍に存在するとすれば、より安定なものにならないか、という素朴な疑問が生じる [4]。

2. 格子間酸素の無限長一次元鎖の安定性 [4]

これまでの報告[1-3]で用いてきたモデルより一回り大きい、図1のような Si 結晶- α SiO₂ 接合モデル内に、2種の無限長さ一次元鎖 (周期境界条件による) を有するモデルを作成し、第一原理計算を実行することにより、両モデル間のエネルギー差を求めた。得られたエネルギー差 (=これを結合エネルギーと定義する) は格子間酸素1個当たり約 0.5 eV で、界面に隣接した方が圧倒的に安定である結果が得られた。Si 結晶内の初期格子間酸素濃度を 1E18/cm³ と仮定し、この結合エネルギーにより格子間酸素が 1 次元鎖内に集まる割合を箱庭法により計算した結果を図2に示す。このように、同界面に隣接した一次元鎖の方が、界面から離れた場合より、600 度も高い温度から形成されると予想された [4]。

3. 現実の SiO₂/Si 界面構造解明への展望

本報告では、格子間酸素の一次元鎖を一例として、長鎖構造の TD を想定した無限長さの一次元鎖が SiO₂/Si 界面近傍で安定化することを見出した。このように酸素原子が同界面において安定性を示すのは、基本的に Si 結晶中で互いに隣接した方が安定である、という酸素原子の本質的な性質によるものである。したがって、同界面において酸素原子は、他にも様々な構造を取りうる可能性がある。

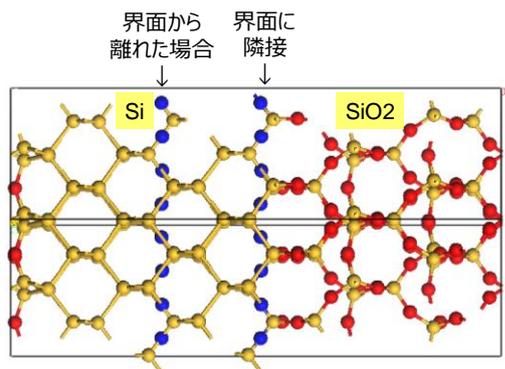
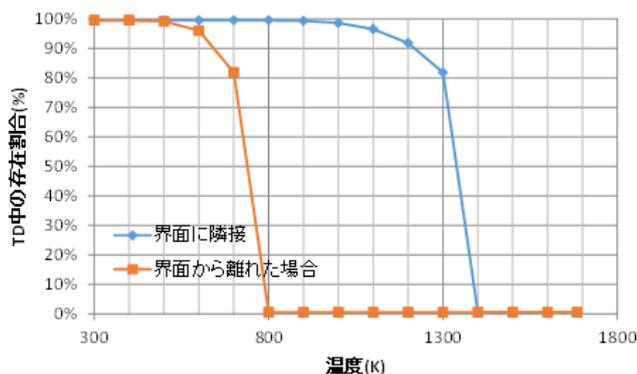
図1 SiO₂/Si 界面からの距離を変えた TD

図2それぞれの TD 中への酸素含有率の温度依存性 [4]

参考文献

- [1] E. Kamiyama and K. Sueoka, *ECS Trans.* **102**, 39(2021). [2] 神山・末岡 2019 年秋応物 18p-PB4-6; E. Kamiyama and K. Sueoka, *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **7**, P102 (2018). [3] 神山・末岡 2020 年春応物 12p-A202-3; 15a-D411-5; Kamiyama and K. Sueoka, *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **9**, 024013 (2020). [4] Kamiyama and K. Sueoka, *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **9**, 054003 (2020).