

Si/SiO₂界面における酸素の挙動に関する第一原理解析First-principles analysis on the behavior of oxide atom near Si/SiO₂ interface岡山県立大学大学院情報系工学研究科¹, 岡山県立大学情報工学部²,ソニーセミコンダクタマニュファクチャリング株式会社³○永倉大樹^{1,3}, 末岡浩治², 神山栄治²Graduate School of Computer Science and Systems Engineering, Okayama Prefectural Univ.¹Faculty of Computer Science and Systems Engineering, Okayama Prefectural Univ.²Sony Semiconductor Manufacturing Corporation³○Hiroki Nagakura^{1,3}, Koji Sueoka², Eiji Kamiyama²E-mail: Hiroki.Nagakura@sony.com

【緒言】CMOSイメージセンサの製造工程における意図しない金属汚染は、フォトダイオード(PD)の空間電荷中に深い不純物準位、すなわちキャリアの発生・再結合中心を形成し、白キズ特性の悪化をもたらす。そのため、金属をデバイス領域外に取り除くゲッタリング技術の開発が非常に重要となっている。Siバルク中の酸素析出物は金属をゲッタリングできることが知られており、そのメカニズム解明のために、酸素析出物界面すなわちSi/SiO₂界面の構造に関する研究がなされてきたり。しかしながら、原子レベルでの構造の解明には至っていない。そこで本研究では、第一原理解析によりSi/SiO₂界面における酸素の挙動に関する知見を得ることで、この界面構造を理解することを目的とした。

【計算方法】図1(左)に示すような先行研究²⁾で用いられているSi結晶 - α水晶界面モデルを用意した。次に、図1(右)に示すSi/SiO₂界面のSi-Si結合中心に酸素原子を1個ずつ追加して結合エネルギーを計算し、そのエネルギーからSi/SiO₂界面における酸素の挙動について考察した。

【計算結果】Si/SiO₂界面における酸素の挙動は、Siバルク中とは異なることを見出した。図2に酸素原子4個目を追加した際の結合エネルギーを示している。Siバルク中では鎖状のTDが安定になるのに対し、Si/SiO₂界面ではTDに隣接しないSi-Siの結合中心が安定となることが分かる。また、Si/SiO₂界面の1層目のSi-Si結合が全て酸素で埋まる前に、酸素の安定位置は2層目、3層目へ移行することも見出した。当日は、歪みによって生じる格子間Siと原子空孔の挙動についても議論する。

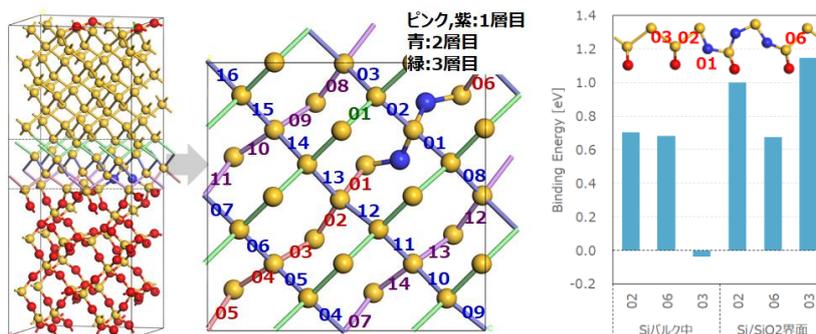
図1 Si/SiO₂界面モデル

図2 酸素原子4個目の結合エネルギー

【謝辞】グローバルウェーブズ・ジャパン株式会社の前田進様に有益な議論をして頂きました。

1. G. Kissinger, D. Kot, A. Huber, R. Kretschmer, T. Müller, and A. Sattler *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **9**, 064002 (2020).
2. E. Kamiyama and K. Sueoka, *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **9**, 054003 (2020).