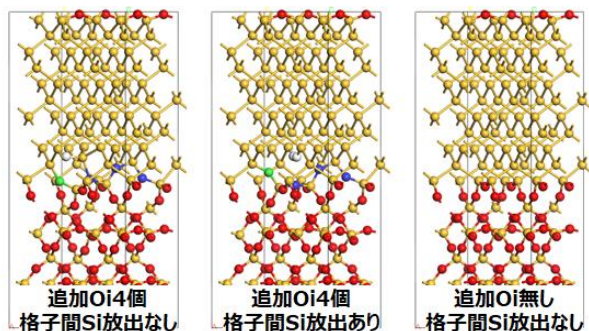
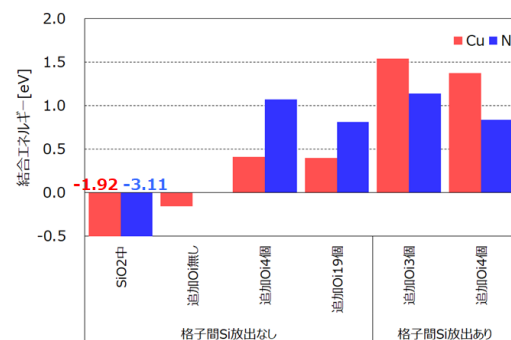


Si/SiO₂ 界面における Cu, Ni の挙動に関する第一原理解析First-principles analysis on the behavior of Cu and Ni atom near Si/SiO₂ interface岡山県立大学大学院情報系工学研究科¹, 岡山県立大学情報工学部²,ソニーセミコンダクタマニュファクチャリング株式会社³○永倉大樹^{1,3}, 末岡浩治², 神山栄治²Graduate School of Computer Science and Systems Engineering, Okayama Prefectural Univ.¹Faculty of Computer 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】Siバルク中の酸素析出物 (SiO₂) は、汚染金属をゲッタリングすることが知られており、とくにCuとNiのゲッタリングに関する多数の実験が行われてきた¹⁾。本研究では、Si/SiO₂界面近傍における酸素吸収と格子間Si放出の挙動に関する計算²⁾により同定した界面構造に注目し、この界面が金属のゲッタリングシンクとなる可能性について研究した。

【計算方法】Si/SiO₂界面近傍における計算²⁾から、酸素原子を4個追加すると図1 (左) に示すように1個のダングリングボンドが生成していることがわかる。酸素原子を19個追加した時にも、同様にダングリングボンドが生成することが確認された。さらに、格子間Siを放出することで、図1 (中央) に示すように2個のダングリングボンドが発生する。これらのモデル界面とCu, Niの結合エネルギーを算出した。なお、参考として図1 (右) に示す、ダングリングボンドが存在しないSi/SiO₂整合界面におけるCu, Niの結合エネルギーも算出した。

【計算結果】図2にSi/SiO₂界面とCu, Niの結合エネルギーを示す。酸素を追加する前はNi, Cuともに結合力が低く、ダングリングボンドが存在しないSi/SiO₂整合界面では金属のゲッタリングが起こらないことが分かる。一方、酸素が追加され、ダングリングボンドが生成したSi/SiO₂界面では、とくにNiの結合エネルギーが大きくなる。また、格子間Siを放出することにより、Cuの結合エネルギーも高くなることが分かる。これらの結果は、酸素析出物の界面に形成されたダングリングボンドがゲッタリングシンクとなる可能性を示唆している。

図1 Si/SiO₂界面モデル図2 Si/SiO₂界面におけるCu, Niの結合エネルギー

【謝辞】グローバルウェーハズ・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] K. Sueoka, *J. Electrochem. Soc.* 152 (2005) G731.

[2] 永倉大樹他, Si/SiO₂界面における酸素の挙動に関する第一原理解析, 本学術講演会。