

## RTP ウェーハの空孔-酸素複合体 ( $VO_4$ ) と金属原子の結合に関する理論的研究

### Theoretical Study on Binding of Vacancy-Oxygen Complex ( $VO_4$ ) to Metals in RTP Wafers

グローバルウェーハズ・ジャパン株式会社<sup>1</sup>

○岩城 浩也<sup>1</sup>, 須藤 治生<sup>1</sup>, 早川 兼<sup>1</sup>, 神山 栄治<sup>1</sup>

GlobalWafers Japan Co., Ltd.<sup>1</sup>

**Hiroya Iwashiro<sup>1</sup>, Haruo Sudo<sup>1</sup>, Ken Hayakawa<sup>1</sup>, and Eiji Kamiyama<sup>1</sup>**

E-mail : [Hiroya\\_Iwashiro@sas-globalwafers.co.jp](mailto:Hiroya_Iwashiro@sas-globalwafers.co.jp)

Si ウェーハへ侵入した金属不純物のゲッターリングサイトとして機能することが知られる Bulk Micro-defect (BMD) の形成手法の1つに Rapid Thermal Process (RTP) がある. RTPによって生成された高濃度の原子空孔 (V) は酸素 (O) と空孔-酸素複合体 ( $VO_x$ ) を形成し, BMDの核形成に寄与すると考えられる[1]. RTP ウェーハの  $VO_x$  形態は, Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR) による分析で少なくとも  $VO_4$  の存在が検出されている[2]. 電子線照射で生成した VO に関して金属不純物のゲッターリング効果を示した実験報告があり[3], 理論計算より VO は金属原子と高い結合エネルギー ( $E_b$ ) を持つことが示されている[4]. RTP ウェーハの  $VO_4$  もゲッターリングサイトとして機能する可能性があるが,  $VO_4$  と金属原子の  $E_b$  を計算した結果はまだ報告されていない. そこで, 第一原理計算を用いて  $VO_4$  と金属原子の  $E_b$  を算出し,  $VO_4$  と金属が複合体を形成する可能性を調査した.

計算モデルは, Si 原子 64 個からなる立方体モデルを用意した. Si モデルに  $VO_4$  及び金属原子を導入し, 第一原理計算を用いてモデルの全エネルギーを求めた. その後, 計算結果から  $VO_4$  と金属原子の  $E_b$  を算出した. 計算結果の例として Fe, Ni と VO,  $VO_2$ ,  $VO_4$  の  $E_b$  を図 1 に示す. 算出した  $E_b$  は複合体形成の指標として用いる事の多い Fe-B の  $E_b$  (0.65 eV) と比較した. Fe は T-site, Ni は H-site へ配置させた. 図 1 より, VO と Fe, Ni の  $E_b$  は 0.65 eV 以上を示しており, 複合体を形成しやすいことが分かる. 次に,  $VO_2$  について, Fe は 0.65 eV 以上の  $E_b$  を示しているが, Ni は 0.65 eV 未満であり, 複合体を形成しにくいことが分かる. これらの結果は先行研究の報告と近い値を示した.  $VO_4$  は最安定構造の場合, Fe, Ni の  $E_b$  は 0.65 eV 未満であり複合体を形成しにくいことが分かる. しかし, 準安定構造の場合は, Fe, Ni の  $E_b$  は 0.65 eV 以上であり複合体を形成しやすいことが分かる. 最安定構造  $VO_4$  は 1 個の V を取り囲むように酸素原子が配置されており, 金属原子が空隙の大きい V 付近へ移動できず,  $E_b$  が小さくなったと考えられる. 一方, 準安定構造  $VO_4$  では酸素原子の配置が最安定構造と異なり, 金属原子が空隙の大きい V 付近へ移動する事ができるため,  $E_b$  が大きくなったと考えられる.

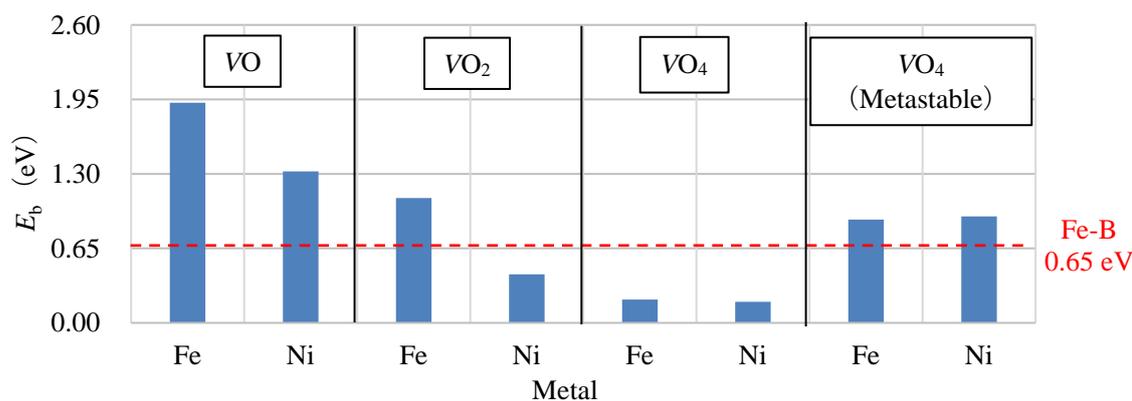


Fig. 1.  $E_b$  of VO,  $VO_2$ ,  $VO_4$  and  $VO_4$  (Metastable) with Metal.

- [1] R. Falster, V. V. Voronkov, F. Quast, *physica status solidi (b)*, Volume 222, Issue 1, pp. 219-244.  
 [2] V. Akhmetov, G. Kissinger, and W. von Ammon, *Physica B*, 404 (2009) p.4572.  
 [3] Nikolai Yarykin and Jorg Weber, *Applied Physics Letters* 109, 102101 (2016).  
 [4] Sho Shirasawa, Koji Sueoka, Tadashi Yamaguchi, Kazuyoshi Maekawa, *Materials Science in Semiconductor Processing* 44 (2016) pp. 13-17.