

Si 結晶と各種 SiO₂ との結晶構造整合性Matching of SiO₂ crystal structures to a Si crystal¹グローバルウェーハズ・ジャパン(株), ²岡山県立大情報工 [○]神山栄治 ^{1,2}, 末岡浩治 ²¹ GlobalWafers Japan Co., Ltd., ² Okayama Pref. Univ., [○]E. Kamiyama^{1,2}, K. Sueoka²

E-mail: ejkamiyama@aol.com

SiO₂ は, Si 結晶と親和性の高い材料と考えられ, Si 系 MOS デバイスのゲート絶縁膜として, 長年使用されてきた. また, デバイスの世代が進んでくると, デバイスで使用される多様な金属に対する有効なゲッタリング源として, ウェーハ平坦度への影響も少ない Si ウェーハ中の微小酸素析出物 (中心部の組成は SiO₂ とされる) が広く用いられるようになった. これらの SiO₂ は, アモルファス構造とされ, 結晶周期性を有さないものとみなされている. しかしながら, これらの SiO₂ は, いずれも Si 結晶を酸化することで得られるものであることから, かつて Si 結晶であったことの何等かの履歴を有するという推測も成り立つ. 事実, Si ウェーハ表面を酸化後の表面酸化膜が, X 線を用いた高精度な手法によって結晶周期性を示したとする報告も存在する [1, 2].

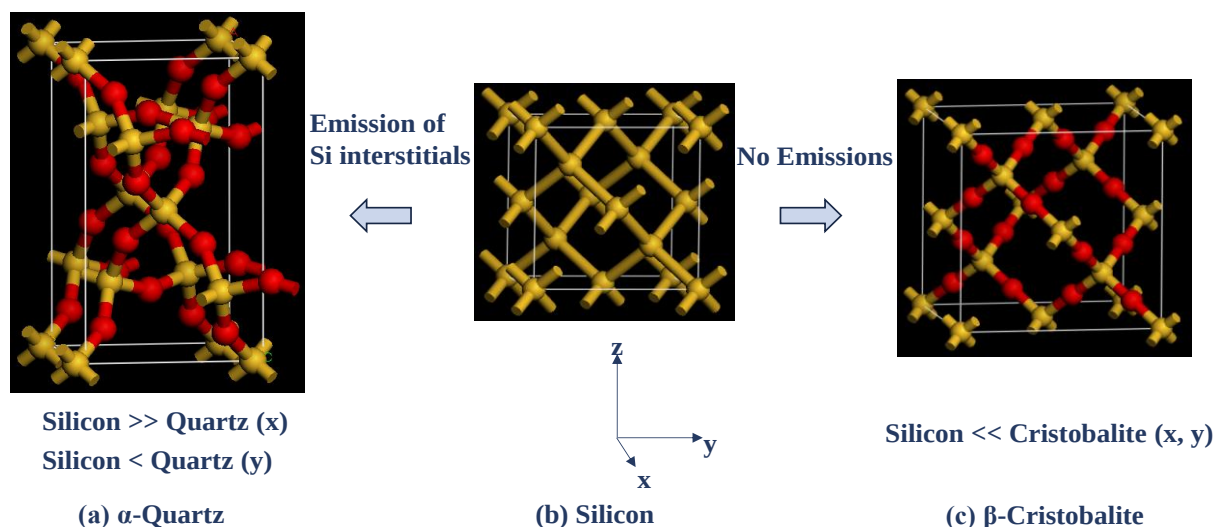
そういった目で Si 結晶と関連しそうな SiO₂ 結晶とを比較すると, 図 1 のようになる [3]. (b) の Si の慣用単位胞から出発し, Si 結晶中 (Si 原子はベージュ色の球) の Si-Si 結合中心に入りやすい酸素原子 (赤球) を同中心へ入れていくことで進行する Si 結晶の酸化プロセスを考える. すべての Si-Si 結合中心に入れて, 第一原理計算で構造最適化したものが(c)の β -Cristobalite で, 酸素

原子の挿入により, すべての軸方向で Si より膨張する. 一方, Si-Si 結合中心への酸素挿入を 3/4 に抑え, 同一 x 面上の 2 個の Si 原子を取り除いてから構造最適化して得られたものが, (a) の α -Quartz である. この構造緩和に際してのセル膨張は主に z 方向であり, y 方向の膨張は(c)ほどでもなく, x 方向は寧ろ, Si 結晶よりも若干収縮するという特徴がみられた.

Si 結晶の酸化に際して, 上述のセル膨張・収縮と, 酸化の進行する界面より格子間 Si の放出が観察されることを加味して考えると, Si 結晶と最も相性良い SiO₂ 結晶は α -Quartz であり, Si-SiO₂ 界面を扱ったモデルにおいて, α -Quartz を採用した原子モデルシミュレーションの報告も最も多い. しかしながら, 界面の酸化反応に際して, 格子間 Si の放出を伴わずに, (c) の β -Cristobalite の状態が残存する可能性は残されているはずである. そこで今後は, この Cristobalite 残存の割合を見積もる予定である.

参考文献

[1] K. Nagata, et. al., *ECS J. Solid State Sci. Technol.*, **4**, N96 (2015). [2] K. Nagata, et. al., *J. Appl. Phys.*, **119**, 154103 (2016). [3] E. Kamiyama and K. Sueoka, submitted to *J. Appl. Phys.*

図1 Si結晶と関連しそうなSiO₂結晶との比較図 [3]