

金属偏析予測システム SurfSeg への拡散温度予測の追加

Adding Estimated Diffusion Temperature to Segregation Prediction System “SurfSeg”

○吉武 道子¹ (1. 物材機構)

^o**Michiko Yoshitake**¹ (1.National Institute for Materials Science)

E-mail: yoshitake.michiko@nims.go.jp

合金や金属の積層構造において、特定の金属が表面に濃縮する現象はさまざまな系で観測される。金属が濃縮している形態のうち、表面層の極表面にのみ薄く濃縮している場合を「偏析」と呼んでいる。偏析現象は、熱力学的安定性に駆動されて起こる現象である。電子デバイスの電極や配線、磁性材料など様々な箇所で積層構造は利用されており、製造プロセスにおけるアニール中の偏析現象は、好ましい構造を作製するために利用されたり、逆に問題を引き起こしたりする。

我々は、金属の積層構造において、下地の金属がその上の膜の粒界を拡散して膜表面に偏析する現象を観測し、下地の金属と膜の金属の種類の組み合わせにより、偏析現象が起こるかどうかを予測する方法を確立した[1]。27通りの膜-基板の元素の組み合わせで行った実験では、予測的中率は80%を超えた。この予測法を、ユーザーが簡便に予測結果を得られるシステム、SurfSegとして開発し、2009年4月より一般公開している[2]。ユーザーからの要望により、酸素雰囲気下アニール時における偏析予測法も開発し[3]、前述の予測システムにアニール雰囲気を選択して予測できるプログラムを追加

Prediction of segregation

し公開している[4]。

今回、NIMS の拡散データベース[5]中の拡散データを用いて、偏析の有無の予測だけでなく、偏析が起こるアニール温度についても予測し表示するプログラムを追加した（右図参照）。

First, select A or B, then choose element of A(substrate) or B(film) from the periodic table.

☐ B (Film)	Ti
☒ A (Substrate)	Cu

Choose other elements

Choose annealing condition

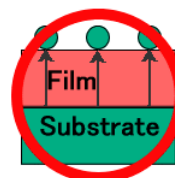
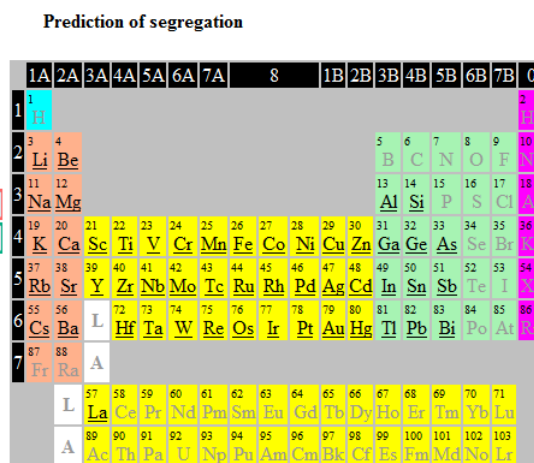
- ☒ vacuum or inert
- ☐ oxygen adsorption
- ☐ hydrogen adsorption

Calculate

[Top](#)

Annealing temperature: $361 \pm 32\text{K}$
using Diffusion coefficient $\approx x^2/2t$,
where

film thickness $x \sim 1 \mu\text{m} = 10^{-6}(\text{m})$,
annealing time $t \sim 1800 (\text{s})$



Adsorption energy
Cu on Ti : 310 kJ/mol
Cu on Cu : 265 kJ/mol

- [1] M.Yoshitake, Y.Aparna and
K.Yoshihara,
J.Vac.Sci.Technol., A19,
1432-1437(2001).

- [2] 吉武道子, 2012 年秋季応用物理学会 12p-C12-1 ; <http://surfseg.nims.go.jp/>
- [3] 吉武道子, 2013 年春季応用物理学会 30a-G7-8 ; M. Yoshitake, Jpn. J. Appl. Phys. 51 (2012) 085601.
- [4] 吉武道子, 2014 年春季応用物理学会 20p-D8-8 ; 表面科学 34, 340-345(2013).
- [5] <http://mits.nims.go.jp/>