

RTP ウェーハの BMD 析出核 (VO_x) 構造に関する理論的研究

Theoretical Study on Structure of BMD Nuclei (VO_x) in RTP Wafers

グローバルウェーハズ・ジャパン株式会社¹, 岡山県大院情報系工², 岡山県大情報工³

○岩城 浩也^{1,2}, 須藤 治生¹, 早川 兼¹, 神山 栄治¹, 末岡 浩治³

GlobalWafers Japan Co., Ltd.¹, Graduate school of Computer Science and systems Engineering,
Okayama Prefectural Univ.², Okayama Prefectural Univ.³

○Hiroya Iwashiro^{1,2}, Haruo Sudo¹, Ken Hayakawa¹, Eiji Kamiyama¹, and Koji Sueoka³

E-mail : Hiroya_Iwashiro@sas-globalwafers.co.jp

シリコン (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 の析出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]。また、BMD 密度と V 濃度には相関がある事が判明しており、BMD 密度は V 濃度の 4 乗に比例する[3]。これより、BMD 析出核の形態は 4VO_4 と推定される。 VO_4 の安定構造は先行研究より提案されているが[4]、 4VO_4 の具体的な安定構造を提案した先行研究はない。そこで、本研究では、第一原理計算を用いて、 VO_4 が 4 個集まる際の結合エネルギー (E_b) を算出し、 4VO_4 の安定構造を探索した。

計算モデルは、Si 原子 512 個からなる立方体モデルを用意した。この Si モデルに VO_4 を 4 個配置するが、無作為に配置した場合、計算を行うモデル数が非常に多くなる。そこで、本研究では、2 回対称性を有する V 配置、3 回対称性を有する V 配置、2 回対称性と 3 回対称性両方を有する V 配置の 3 種類を考慮する。これらの V 配置へ、O を 16 個配置し 4VO_4 構造を作成した。作成した 4VO_4 モデルの全エネルギーを第一原理計算より求め、 VO_4 が 4 個集まる E_b を算出した。

計算の結果、3 回対称性を有する V 配置より、2 回対称性を有する V 配置の方が E_b は大きくなる結果となった。3 回対称性を有する V 配置は、2 回対称性を有する V 配置に比べ、V 同士の距離が離れている。そのため、 VO_4 同士が強く結びつくことができず、エネルギー的に不安定になったと考えられる。また、2 回対称性を有する V 配置の中でも、図 1 に示す 4VO_4 構造の E_b が最も高くなり、3.6 eV を示した。これは、 VO_4 が 4 個集まる事でエネルギー利得がある事を示しており、RTP で導入された VO_4 が BMD へ成長する過程で 4VO_4 の形態となる可能性は十分にある。

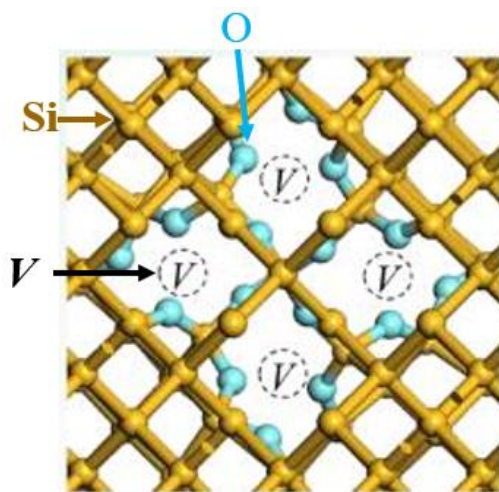


Fig. 1. The Most stable structure of 4VO_4 .

- [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] Haruo Sudo, et al., ECS Journal of Solid State Science and Technology, 8(1)P35-40(2019)
- [4] G. Kissinger, et al., Journal of The Electrochemical Society, 158(4) H343-H346(2011)