

Si ウェーハの表面熱酸化膜中の Cristobalite 相

Cristobalite phase inside thermally-oxidized films on Si wafers

¹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

当グループではこれまで, Si 結晶を酸化して得られる SiO₂ 膜の原子構造について, Si 結晶の酸化に際して格子間 Si の放出を伴わずに Si 結晶の構造を引き継いだ β -Cristobalite (Ideal) (C) と格子間 Si 放出により生成する α -Quartz (Q) の「合金」のモデルを提唱してきた [1,2]. このモデルにおいて, 第一原理計算から得られる膜のエネルギーから, 熱平衡を仮定することで, 大半が Q となるものの, 一定量の C も残存することを示した [2]. 実際の酸化においては, 格子間 Si の放出がランダムに起こるものと考えられることから, 上述のモデルの C と Q の配列も無秩序に発生し, 結果として得られる膜がアモルファスになると推定していた.

ところで, Si 表面を熱酸化した SiO₂ 膜/Si 界面を透過型電子顕微鏡 (TEM) で観察した結果は, 1980 年代から報告されている. しかし, SiO₂ 膜の結晶構造については, 決定的な結果が得られていなかった. ところが, TEM 観察で用いる電子線により試料に入るダメージを極力避けることで, SiO₂ 膜/Si 界面で, 格子間 Si の放出を行わない β -Cristobalite /Si 基板構造である Pseudo-

Cristobalite モデルが 2012 年に提案された [3]. 本報告では, この Pseudo-Cristobalite モデルを第一原理計算により調査し, まず, この構造の出現可能性について考察する [4].

図 1(a)に提案された Pseudo-Cristobalite モデルを示す. これを初期構造として作成したモデルの β -Cristobalite 構造は, 第一原理計算による構造最適化の途中から構造が崩れ, (b)のような構造となって計算が終了した. この(b)の構造では, 酸素 1 原子あたり, 1.7 eV もエネルギーが低く安定であった. すなわち, (a)構造が極めて不安定であったことになるが, それでも実際に TEM で観察されたことは興味深い.

また, 構造最適化で得られた図 1(b)の SiO₂ の結晶構造は, 1970 年代から知られる β -Cristobalite の別の構造(Another)である [5]. Si 基板との整合性を調べるため, SiO₂ 1 分子当たりのエネルギーの格子定数依存性を計算したものが図 2 である. この結果から, Another Structure は, Quartz に次いで, Si との整合性 (緑線が Si の格子定数を示す) の良いことが分かった.

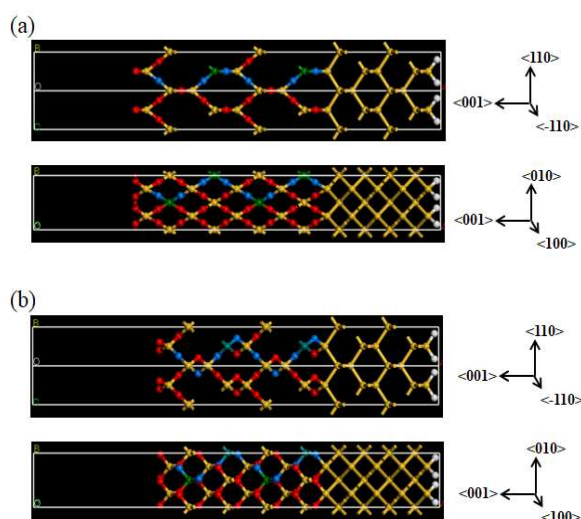


図 1 (a) Pseudo-Cristobalite モデル(Ideal),
(b)構造緩和後のモデル(Another の β -Cristobalite), [4]

参考文献

[1] 神山他 2023 年春応物 15a-D511-7. [2] 神山他 2023 年秋応物 19a-B201-5; E. Kamiyama and K. Sueoka, *J. Appl. Phys.* **134**, 115301 (2023). [3] K. Kimoto, et. al, *AIP Adv.* **2**, 042144 (2012). [4] E. Kamiyama and K. Sueoka, submitted to *AIP Adv.* [5] A. F. Wright and A. J. Leadbetter, *Philos. Mag.* **31**, 1391 (1975).

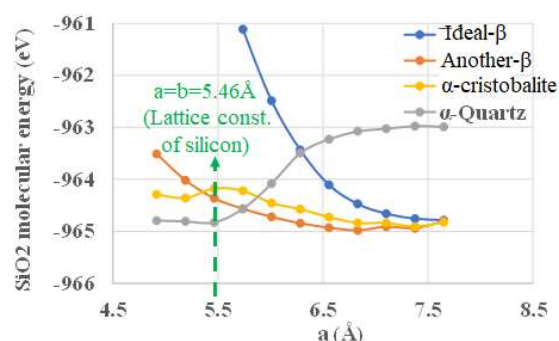


図 2 各種 SiO₂ の Si との整合性 [4]