

Si ウェーハ表面酸化モデル (ii) 格子間 Si 原子の放出について

Surface oxidation model for Si wafers: (ii) Emission of interstitial Si atoms

¹グローバルウェハズ・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

前講演 [1]に引き続き, Si ウェーハの表面酸化モデルを考える. ここには, Si 結晶中における酸素原子の性質が関与する. すなわち, 酸化処理などの熱処理後の降温時に過飽和となった酸素が, 過飽和状態を解消するために形成する凝集形態として, 800°C以上では正八面体又は板状の酸素析出物, それより低い温度帯では格子間酸素 (Oi) が Si の(110)方向の結合中心サイトに1次元的に整列する基本構造を持つサーマルドナー (TD) が知られる. また, 酸化によって一旦形成された Si/SiO₂ 界面においても, 後者の性質を持った異方的な Oi の整列状態が安定であることが計算により示されている [2].

以上の結果を受け, 図1に示すような異方的 Oi の整列を表現可能な大きさの界面を持つ Quartz/Si 接合モデルを用い, 複数 Oi の整列を調査した [3]. その結果, Quartz/Si 接合界面に Oi が1次元的に整列する傾向があり, さらに, 1次元的に整列し始めた界面付近の Si 原子に大きな歪が発生することが明らかとなった (図2). また, 図3に示すように, その Si サイトに原子空孔が形成するエネルギーがバルク中のエネルギーより

りも低下し, Oi が3個以上整列では負となることも判明した. このことは, SiO₂/Si 界面において, フレンケルペアが自発的に発生することと, ペアの原子空孔は界面に留まり, 酸化に伴う体積膨張を吸収する一方, ペアの格子間 Si は界面から拡散して散逸する可能性を示唆する. なお, 整列する Oi の起源として, 表面酸化膜を通して拡散してくるものと, 基板内部の溶存酸素が拡散して界面に到達するものの両者が存在する [4].

謝辞

モデル作成・計算実行・考察でご協力いただいた, 岡山県立大学の永倉博士に感謝いたします.

参考文献

[1] 神山他 2024 年秋応物 前講演. [2] 神山他 2021 年秋応物 10p-N203-1; E. Kamiyama and K. Sueoka, *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **9**, 054003 (2020). [3] 永倉他 2021 年秋応物 10p-N203-2, 3; H. Nagakura, E. Kamiyama and K. Sueoka, *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **10** (2021) 123003. [4] E. Kamiyama and K. Sueoka, submitted to *AIP Adv.*



図1.異方的表現可能な界面モデル

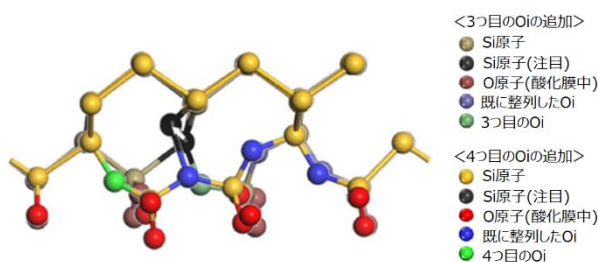


図2. Oi の整列により生じた Si の歪 [3]

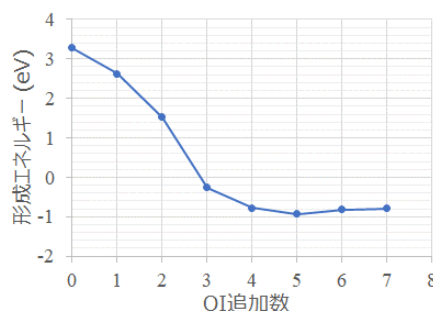


図3. 原子空孔の形成 E の界面整列 Oi 個数依存性 [3]