

Si (111) 表面酸化における初期減速と自己加速

Initial oxidation rate deceleration and self-acceleration in Si(111) surface oxidation

日本大学¹, 日本原子力研究開発機構², 東北大学³ (B) Hengyu Wen¹, 津田 泰孝²,(B) 岡部 優希¹, 吉越 章隆², 高桑 雄二^{2,3}, °小川 修一¹Nihon Univ.¹, JAEA², Tohoku Univ.³ Hengyu Wen¹, Yasutaka Tsuda², Yuki Okabe¹,Akitaka Yoshigoe², Yuji Takakuwa^{2,3}, °Shuichi Ogawa¹

E-mail: ogawa.shuichi@nihon-u.ac.jp

次世代 MOSFET のゲートスタック形成で不可欠な Si ドライ酸化プロセスによる酸化速度 (dX_0/dt) は、2~1000 nm の広範囲にわたり式(1)で記述できる[1]。

$$\frac{dX_0}{dt} = C_1 \exp\left(-\frac{X_0}{L_1}\right) + C_2 \exp\left(-\frac{X_0}{L_2}\right) + \frac{B}{2X_0 + A} \quad (1)$$

第一項と第二項は初期増速酸化、第三項は Linear-Parabolic 成長によるものである。約 30 nm 以下では第一項と第二項は消失し、第三項のみが顕在する。そのため膜厚 X_0 の増加に従って dX_0/dt は急減速するはずが、逆に自己加速しているとも見られる。このような急減速/自己加速は Si(111)表面の室温酸化でも観察された[2]。本研究では Si(111)表面酸化のリアルタイム XPS 観察から、 X_0 、 dX_0/dt 、Si 酸化状態、歪み Si 原子、バンドベンディングの変化に加え、酸素吸着配向の情報から急減速/自己加速の反応機構を検討する。

リアルタイム XPS 観察は BL23SU@SPring-8 に設置された表面化学反応解析装置を用いて行なった。 X_0 は式(2)を用いて解析した(図 1(a)) [3-5]。

$$X_0 = A_A(1 - e^{-k_A t}) + A_B(1 - e^{-k_B t}) + \frac{1}{2} \left[-A + \sqrt{A^2 + 4B(t + \tau)} \right] \quad (2)$$

第一項は空孔での一段階酸化反応 (Loop A)、第二項は二段階酸化反応 (Loop B) によるもので空孔密度について一次反応である[3]。これに対して第三項 (Linear-Parabolic growth) は薄膜領域で $X_0 \cong \frac{B}{A}t$ で近似できるように 0 次反応である。図 1(b)から分かるように 5000 秒付近で急減速から自己加速に移行する。550°Cでも自己加速酸化は見られるものの、Loop B とともに寄与は減少し、逆に Loop A の寄与が増加した。自己加速酸化領域で酸素吸着配向の *ins* が減少し *tri/ad* が増加することから、Si 酸化による体積膨張と吸着熱が一次反応では点欠陥発生、0 次反応では Si-O 結合切断をもたらし、そのとき出現する未結合手での O₂ 解離吸着モデルを提案する。

[1] H.M. Massoud *et al.*, J. Electrochem. Soc. **132**, 2685 (1985). [2] J. Tang *et al.*, Surf. Interface Anal. **46**, 1147 (2014). [3] S. Ogawa *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **59**, SM0801 (2020). [4] Y. Tsuda *et al.*, J. Chem. Phys. **157**, 234705 (2022). [5] Y. Tsuda *et al.*, e-J. Surf. Sci. Nanotech. **21**, 30 (2023).

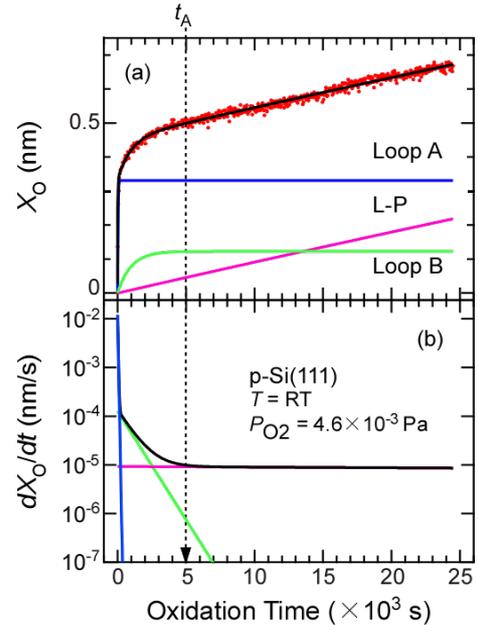


図 1 (a) X_0 の Loops A/B モデルと Linear-parabolic モデルを組み合わせた解析と (b) 酸化速度の比較