

## 化学的蒸着 (CVD) の原子モデリング： シリコンオキシナイトライド

モトローラ社とBIOVIA社の研究者たちはBIOVIAのC2・DMol<sup>3</sup>ソフトウェアを用いて、Si(100)表面へのNOの蒸着に関し研究しました。これは化学蒸着過程のモデルリングを実現するための方向を示す重要な研究といえます。

### はじめに

化学的蒸着 (CVD) は、正確な化学的組成および均一な構造を持つ、薄くて高品質の膜を生産するための有力な方法です。膜の成長速度、均一性および組成をより適切に管理するためのCVDプロセス条件 (たとえば、圧力、温度、先駆物質および反応装置の設定) の最適化は、反応装置モデルを用いて達成できます。これらのモデルではまた、析出化学の詳しい理解が必要ですが、そうした理解は実験を行って得ることができません。しかし、シリコンウェーハを使用した実験は多くの費用と時間がかかります。従って、理論的モデリングは、反応装置モデルの入力パラメータを得るための魅力的な代替手段となります。

気相化学の理解は、表面反応メカニズムの認識をはるかに越えています。その問題は、実験的また理論的観点から見てもさらに複雑です。半導体表面の微細構造と触媒の性質はその問題の複雑さをおおいに増しています。表面析出を説明する総合的な理論的フレームワークについてはまだ書かれたものはありません。

### Si (100) 上でのNOの反応メカニズム

シリコンオキシナイトライドは、いくつかのエレクトロニクス用途に登場しています。酸化物-窒化物-酸化物の構造は、DRAMおよびEEPROM装置に広範囲に用いられています。そのような構造における界面領域はシリコンオキシナイトライドです。非晶質の窒化ケイ素は有望なゲート誘電性物質です (その誘電率は二酸化ケイ素の誘電率の二倍以上)。しかし、Si上に直接成長したSiN膜との界面は、それほど品質が高くありません。

NOをSi(100)表面に析出させた後、オキシナイトライドが成長する課程が、このコンピュータ利用研究における1つのモデルとして選ばれています。目標は、初期のSi(100)表面へのNOの析出と、シリコンオキシナイトライドの成長を定量的および定性的に記述することです。この研究はさらにオキシナイトライド膜構造、エネルギー特性および物理的性質の理解を深めると思われます。

この研究では、一酸化窒素NOとSi(100)(2x1)表面間の初期反応の理論的な解析を報告しています。2つのタイプのSiモデル、すなわち分子クラスターと、端点を水素化した無限シリコンスラブモデルが検討されました。

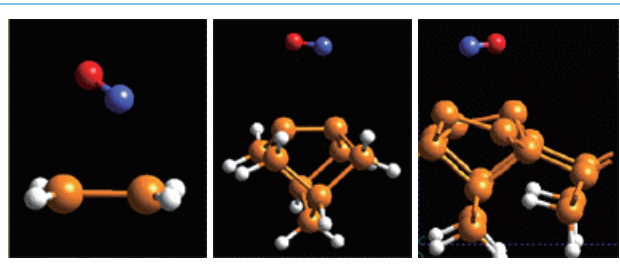
私達は、上記の3つの異なったモデルを用い、NOとケイ素表面との間の反応メカニズムに関連するさまざまな構造を調べました。クラスターモデル (IおよびII) は、B3LYP/6-31G\*およびBP/DNP、PWC/DNP法を用いて研究を行う一方、周期系では、BP/DNP、PWC/DNP法を用いて研究を行いました。妥当性を確認するために、最も簡単なモデル (I) はカップルドクラスターab initio法および二次摂動理論でも調べました。

## Organization

Motorola Inc

## Products

BIOVIA Materials Studio DMol<sup>3</sup>



1. 最も簡素化されたクラスターモデルは、Si<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+NO系で表され、表面上の「活性」反応中心としてケイ素の二重結合のみを含んでいます。
2. 第二のクラスターは9個のケイ素原子と12個の水素原子を含み、表面のSi-Si二重結合と結晶内の直接接する化学的環境、および材料本体により課される構造上の拘束を表現しています。
3. 最も高度なモデルで、末端を水素原子で終結させている無限のケイ素スラブから成り、周期単位セル中に16個のケイ素原子と8個の水素原子を含み、表面とその下のケイ素層を再現します。