

歪環境下における Ni シリサイドの相図

Phase diagram of Nickel silicide in strain field

千葉大学 理学研究科 °飯塚将太, 中山隆史

°S.Iizuka, T.Nakayama, Department of Physics, Chiba Univ.

E-mail: iizuka@chiba-u.jp

[背景・目的] ナノ構造のデバイスでは界面から巨大な歪場が発生し、通常の成長では存在できない結晶相が現れることがある。最近、東工大の岩井グループでは、Si ナノワイヤーに Ni シリサイド電極を形成した場合、同条件で平坦な Si 基板上に形成する時には現れない組成のシリサイドが成長することを見出した。その原因として、ワイヤーを囲む SiO₂ 酸化膜から大きな歪場を受けていることや、ワイヤー断面積の小ささに起因して成長過程に変化が起こることなどが考えられる。しかし、未だその起源は明らかでない。そこで本研究では、熱平衡時の各相の自由エネルギーの観点から、歪場が Ni シリサイドの安定相に与える効果とその原因を数値計算により検討した。

[方法] 数値計算は密度汎関数法に基づく第一原理計算を用いた。本研究では、Ni シリサイド Ni_xSi_y のうち、組成比が x:y=3:1, 2:1, 1:1, 1:2 の 4 つの相を考慮した。歪場としては、シリサイドは歪んだ Si と格子整合して界面を形成していると仮定し、2 軸性の伸長及び圧縮歪の両方を考える。こうした歪環境下でのシリサイドの最安定構造を決定し、安定組成の相図を、Si と Ni の供給量、すなわち化学ポテンシャルの関数として求めた。

[結果] 数値計算により、一般的には、伸長歪を受けると Ni 組成の高い相が安定になる傾向が見られた。これは、上記の実験においてシリサイドが SiO₂ から引っ張り歪を受けていることを示唆する。また、各組成相のエネルギーを成分に分けて検討すると、全ての相に共通して、圧縮歪では主に電子の運動エネルギーと電子-イオン間相互作用エネルギーが損をし、また伸長歪では主にイオン間相互作用エネルギーが損をすることがわかった。この結果は、各相の共有結合性と金属結合性の割合がどの組成相を安定にするかに関係することを示唆する。発表では、変動したエネルギーと各組成相に生じる共有・金属結合との関係から、組成の相図境界が歪環境とともに移動する原因を議論する。

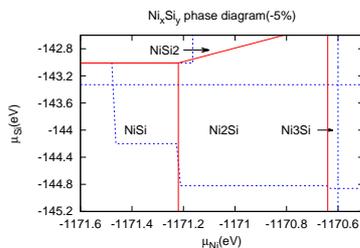


図 1 圧縮歪環境下における Ni_xSi_y の相図

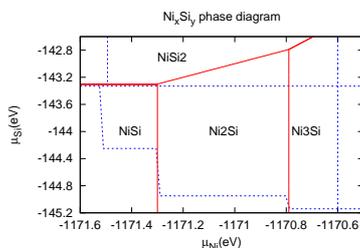


図 2 バルクにおける Ni_xSi_y の相図

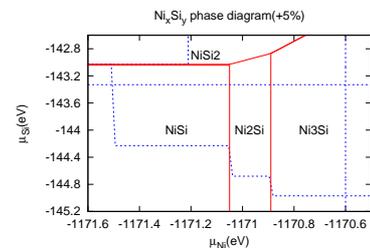


図 3 伸長歪環境下における Ni_xSi_y の相図