

论文
Ta₂O₅在Si(100)表面原子层沉积反应机理的密度泛函研究

任杰¹, 周广芬¹, 郭子成¹, 张卫²

1. 河北科技大学理学院, 石家庄 050018;
2. 复旦大学微电子学系, 专用集成电路与系统国家重点实验室, 上海 200433

摘要:

采用密度泛函方法研究了以TaCl₅和H₂O作为先驱体在硅表面原子层沉积(ALD) Ta₂O₅的初始反应机理. Ta₂O₅的原子层沉积过程包括两个连续的“半反应”, 即TaCl₅和H₂O“半反应”. 两个“半反应”都经历了一个相似的吸附-中间体反应路径. 通过H钝化和羟基预处理硅表面反应能量的比较发现, TaCl₅在羟基预处理硅的表面反应是热力学和动力学都更加有利的反应. 另外, 从能量上看, H₂O的“半反应”不容易向生成产物的方向进行.

关键词: 密度泛函理论; 原子层沉积; 氧化钽

Density Functional Theory Study on the Surface Reaction Mechanism of Atomic Layer Deposited Ta₂O₅ on Si(100) Surfaces

REN Jie^{1*}, ZHOU Guang-Fen¹, GUO Zi-Cheng¹, ZHANG Wei^{2*}

1. College of Science, Hebei University of Science and Technology, Shijiazhuang 050018, China;
2. State Key Laboratory of Application Specific Integrated Circuits and System, Department of Microelectronics, Fudan University, Shanghai 200433, China

Abstract:

The surface reaction mechanism of atomic layer deposited(ALD) Ta₂O₅ on silicon surfaces was studied via density functional theory. The ALD process is designed into two sequential half-reactions, i.e., TaCl₅ and H₂O half-reactions. Both of them proceed through an analogous trapping-mediated mechanism. By comparing with the reactions of TaCl₅ on the H-terminated silicon surfaces, we find that it is both kinetically and thermodynamically more favorable for the reactions of TaCl₅ on the hydroxylated silicon surfaces. In addition, we also find that it is energetically unfavorable for the H₂O half-reactions.

Keywords: Density functional theory; Atomic layer deposition; Tantalum pentoxide

收稿日期 2008-09-24 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

国家自然科学基金(批准号: 20973052, 60776017)和河北科技大学杰出青年基金(批准号: 2006JC-3)资助.

通讯作者: 任杰, 男, 博士, 副教授, 主要从事理论和计算化学研究. E-mail: renjie@fudan.edu.cn; 张卫, 男, 博士, 教授, 主要从事集成电路工艺、半导体材料和器件研究. E-mail: dwzhang@fudan.ac.cn

作者简介:

参考文献:

[1]Lo G. Q., Kwong D. L., Lee S.. Appl. Phys. Lett. [J], 1993, 62: 973—975

[2]Shimizu K., Katayama M., Funaki H., et al.. J. Appl. Phys. [J], 1993, 74: 375—380

[3]YAN Zhi-Qiao(闫志巧), XIONG Xiang(熊翔), XIAO Peng(肖鹏), et al.. J. Funct. Mater.(功能材料) [J], 2006, 37(4): 511—514

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(433KB)

[HTML全文]

[\(article.html_WenJianDaXiao\).
KB\)](#)

参考文献[PDF]

参考文献

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

密度泛函理论; 原子层沉积; 氧化钽

本文作者相关文章

PubMed

[4]An C. H., Sugimoto K.. J. Electrochem. Soc.

[J], 1992, 139(7): 1956—1962

[5]Kukli K., Aarik J., Aidla A., et al.. Thin Solid Films

[J], 1995, 260: 135—142

[6]Aarik J., Aidla A., Kukli K., et al.. J. Cryst. Growth

[J], 1994, 144: 116—119

[7]Aarik J., Kukli K., Aidla A., et al.. Appl. Surf. Sci.

[J], 1996, 103: 331—341

[8]Ren J., Hu Y., Wang J., et al.. Thin Solid Films

[J], 2008, 516: 2966—2972

[9]Ren J., Sun B., Zhang D. W.. Appl. Surf. Sci.

[J], 2007, 253: 9148—9153

[10]Ren J., Lu H. L., Chen W., et al.. Appl. Surf. Sci.

[J], 2006, 252: 8466—8470

[11]Siodmiak M., Frenking G., Korkin A.. J. Phys. Chem. A

[J], 2000, 104: 1186—1195

[12]Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., et al.. Gaussian 03, Revision D.01

[CP], Pittsburgh PA: Gaussian Inc., 2004

[13]Becke A. D.. J. Chem. Phys.

[J], 1993, 98(7): 5648—5652

[14]Becke A. D.. Phys. Rev. A

[J], 1988, 38(6): 3098—3100

[15]Lee C., Yang W., Parr R. G.. Phys. Rev. B

[J], 1988, 37(2): 785—789

[16]ZHOU Zhong-Jun(周中军), LIU Hui-Ling(刘慧玲), HUANG Xu-Ri(黄旭日), et al.. Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)

[J], 2008, 29(8): 1641—1643

本刊中的类似文章

文章评论

反馈人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反馈标题	<input type="text"/>	验证码	<input type="text"/> 0815