

分子軌道法を用いた絶縁破壊電界推定法の考察
 Estimation method of breakdown electric-field strength
 by using a molecular orbital calculation technique

早大理工,¹ 慶應大,² 宇宙研³

○若尾 周一郎,^{1,3} 関 洋,^{2,3} 小林 大輔,³ 山本 知之,¹ 泰岡 顕示,² 廣瀬 和之³

Waseda Univ.,¹ Keio Univ.,² ISAS/JAXA.³

○ Shuichiro Wakao,^{1,3} Hiroshi Seki,^{2,3} Daisuke Kobayashi,³

Tomoyuki Yamamoto,¹ Kenji Yasuoka,² and Kazuyuki Hirose³

E-mail: s.wakao@ac.jaxa.jp

【はじめに】近年、LSIの高集積化とともにMOSFETのゲート酸化膜が1 nm程度と薄くなり、酸化膜の欠陥の影響により絶縁破壊電界が低下することが懸念されている。そこでLSIの信頼性を確保する上で、ゲート酸化膜の絶縁破壊電界に与える欠陥の影響を評価することが非常に重要なこととなっている。一般に絶縁破壊電界はバンドギャップから良く推定することができる (Fig. 1)。我々は、ゲート酸化膜に対する欠陥の影響を予想するために、バンドギャップに代わるパラメータとして回復率を提案した。その結果、欠陥のないSiおよびAl化合物について計算した回復率が、絶縁破壊電界と良い相関関係にあることを見いだした[1]。そして種々の欠陥が存在するSiO₂の回復率を求めることで、欠陥が絶縁破壊電界の低下に与える影響を考察した[1]。今回は、Ga化合物についても回復率を計算して、回復率と絶縁破壊電界との間に相関関係があるかどうかを検討し、本推定法の適用範囲と原理について考察した。

【方法】Ga化合物 (GaAs, GaP, GaN, Ga₂O₃) を電気陰性度の小さなGaを中心原子とするクラスターモデルで表し、電子状態を DV-X α 分子軌道法を用いて計算した。中心Ga原子の内殻軌道から電子を取り除くことで内部電界を発生させた。基底状態では電気陰性度の大きい近接原子に引きつけられていた価電子が中心Ga原子に戻ってくる。ここで取り除いた内殻電子数に対する中心原子に戻った価電子数を回復率として求めた。

【結果】回復率と絶縁破壊電界の相関をFig. 2に示す。SiおよびAl化合物と同じように、Ga化合物においても回復率が大きくなると絶縁破壊電界が低下するという相関が見られた。また、バンドギャップに相当するHOMO-LUMO間エネルギーギャップと回復率にも良い相関があることを確認した。これらのことから、回復率は絶縁破壊電界推定に用いることのできるバンドギャップに代わる優れたパラメータであることが支持された。

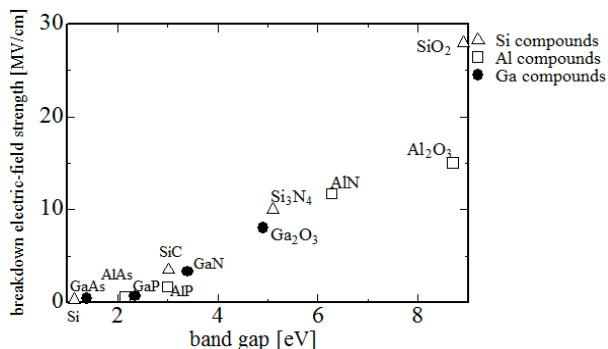


Fig.1 The relationship between band gap and breakdown electric-field strength

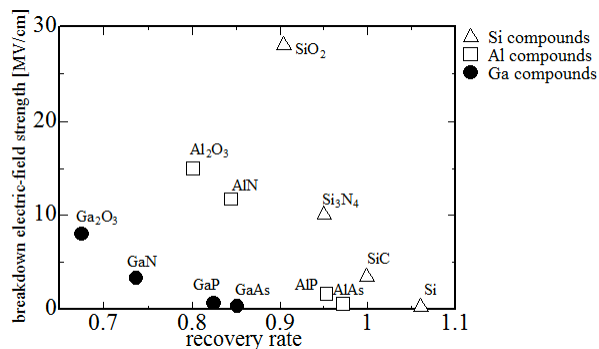


Fig.2 The relationship between recovery rate and breakdown electric-field strength

[1] H. Seki, Y. Shibuya, D. Kobayashi, H. Nohira, K. Yasuoka, and K. Hirose, Jpn. J. Appl. Phys., 51, 04DA07 (2012).