

SiN_x膜中へのH₂O, HBr分子の透過Penetration of H₂O and HBr molecules into SiN_x films

三菱電機(株) 高周波光デバイス製作所 ○奥 友希 志賀俊彦 戸塚正裕 竹見政義

Mitsubishi Electric Corp., T. Oku, T. Shiga, M. Totsuka, M. Takemi

E-mail: Oku.Tomoki@ap.MitsubishiElectric.co.jp

はじめに：低温形成 (≦300℃)した保護膜中には欠損・欠陥を多く含んでいるので耐湿性・耐ハロゲン性への影響が懸念される．前回までにハロゲン化水素 (HX: X=F, Cl, Br)分子がH₂O分子よりSi₃N₄膜中への透過障壁が小さいこと、アンチサイトリコン(Si_N)欠陥以外の

シリコン・窒素欠損, Si-Si欠陥を含むSiN_x膜中への透過障壁が小さいことを示した．本報告ではSi₃N₄膜中にSiダングリングボンド(≡Si)を導入しH₂O, HBr分子の透過障壁ΔEを計算し保護膜の耐性を分析する．

計算： SiN_x膜中の欠陥モデルは 10 原子層からなるSi₃N₄クラスター分子の透過経路の中央部分(↑)の窒素原子 1 個を欠落又はSi置換させ窒素欠損, Si_N欠陥を形成した．これに隣接するSiダングリングボンド(≡Si), 水素終端(≡SiH)の本数を変えて欠陥を作成した(図 1)．夫々の欠陥を含むSiN_x膜の表面から裏面にH₂O, HBr 分子を透過させ ΔE(Distance)をMO-G (MOPAC2002 ベースの半経験的分子軌道法)で計算した．

結果： H₂O分子透過に関しては窒素欠損有のSiN_x膜中の欠損位置(↑)でのΔEは欠損無のときより小さく, ≡Si本数の増加とともに減少する．≡Si_NH欠陥有のΔEは欠損無のときより大きいが≡Si_N欠陥で減少する (図 2)．HBr分子透過に関してもΔEの欠損・欠陥依存性はH₂O分子と同様だが透過中にΔEが急減する点が異なる (図 3)．ΔE急減の原因はHBr分子がイオン化しH⁺イオンがSiN_x膜中の窒素原子と結合することである．窒素欠損・Si_N欠陥位置でのΔEの増減は透過経路が広がる(狭まる)ことに対応する．≡Si本数増加によるΔE減少は水素原子欠落による透過経路拡大に加えて≡Siのバックボンド側へSi原子が引っ張られて透過経路が拡大する為である．しかしながら, ≡Si濃度は≡SiH濃度より 5 桁少[1]なので透過への影響は小と考えられる．

[1] T. Oku, et al., Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 209, (1991) 487.

