

分子軌道法を用いて求めた回復率の検討

Study of the recovery rate obtained
by molecular orbital calculation technique早大理工,¹ 宇宙研²○若尾 周一郎,^{1,2} 小林 大輔,² 山本 知之,¹ 廣瀬 和之²Waseda Univ.,¹ ISAS/JAXA.²○ Shuichiro Wakao,^{1,2} Daisuke Kobayashi,² Tomoyuki Yamamoto,¹ and Kazuyuki Hirose²

E-mail: s.wakao@ac.jaxa.jp, hirose@isas.jaxa.jp

【はじめに】近年、LSIの高集積化とともにMOSFETのゲート酸化膜は1 nm程度と薄くなり、酸化膜中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。欠陥のないバルク状態の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。我々は、欠陥の影響を簡便に予想するために、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。そして、欠陥のないSi、Al及びGa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だし(Fig. 1)、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推定した[1, 2]。今回は、内殻空孔による内部電界から回復率を再定義した回復率* [cm/MV]を用いて、回復率の原理を考察する。

【計算手法】半導体物質を電気陰性度の小さい陽イオン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ると、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原子に戻ってくる。ここで取り除いた内殻電子数に対して、中心原子に戻った価電子数の比を回復率とする。また、取り除いた内殻電子によって発生した電界に対して、中心原子に戻った価電子数の比を回復率* [cm/MV]とする。

【結果】回復率は陽イオンごとに異なった相関が見られたのに対し、回復率* [cm/MV]は共通の陰イオンを持つ物質同士で近い値をもつことがわかった。また、この陰イオンで整理される回復率*と原子や分子の電子雲が持つ電荷分布の偏りを表す物理量である分極率[C \cdot m²/V]の間に良い相関が見られた。(Fig. 2)

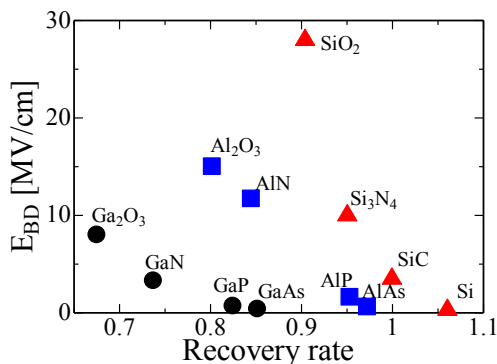


Fig.1 The relationship between recovery rate and breakdown electric-field strength

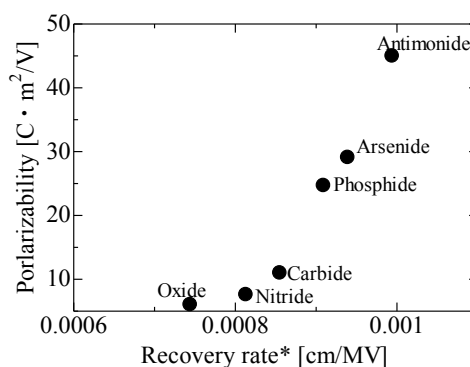


Fig.2 The relationship between recovery rate* and Polarizability

[1] H. Seki *et al.*, J. Appl. Phys., 51, 04DA07 (2012).

[2] 若尾 周一郎 他 第74回秋季応用物理学会17a-B5-8 (2013) .