

高温高湿下で絶縁膜上に形成されるシリコン酸化層

Silicon oxide layer created on insulators under high temperature and high humidity

三菱電機(株)<sup>1</sup>, メルセコンダクタエンジニアリング(株)<sup>2</sup>

○奥 友希<sup>1</sup> 奥村 学<sup>2</sup> 志賀俊彦<sup>1</sup> 戸塚正裕<sup>1</sup> 渡辺 斉<sup>1</sup>

Mitsubishi Electric Corp.<sup>1</sup>, Melco Semiconductor Engineering Corp.<sup>2</sup>

○T. Oku<sup>1</sup>, M. Okumura<sup>2</sup>, T. Shiga<sup>1</sup>, M. Totsuka<sup>1</sup>, H. Watanabe<sup>1</sup>

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・欠陥が多く，耐湿性試験による表面層の酸化に影響することを報告した[1]。SiO<sub>x</sub>酸化層のFTIR (Fourier-transform Infra-Red spectroscopy)スペクトルの急峻なO-Hボンド吸収がPCT (Pressure Cooker Test)後に広バンド吸収に変化する(Fig. 1)。この原因の一部はH<sub>2</sub>O分子，Si-OHボンドによるものと解釈されるが[2]，3000cm<sup>-1</sup>以下の吸収増が説明できない。本報告では分子軌道計算を用いて原因を明らかにする。

計算： 約 300 個の原子からなるSiO<sub>2</sub>クラスターからシリコン原子 1 個を欠落させ水素終端，OH終端することでSiO<sub>x</sub>膜中にSi-OHボンド，SiO-OHボンドをモデル化した。また，SiO<sub>x</sub>クラスター中にH<sub>2</sub>O分子を配置し膜中の水分子をモデル化した(Fig.2)。MO-G (MOPAC2002 ベースの半経験的分子軌道法)を用いてO-H ボンドのDipoleの波数依存性を計算した。

結果： Fig. 3 中で孤立H<sub>2</sub>O分子，SiO<sub>x</sub>膜中のH<sub>2</sub>O分子・Si-OHボンド・SiO-OHボンドのOH振動数をν (Free H<sub>2</sub>O)，ν (H<sub>2</sub>O in SiO<sub>x</sub>)，ν (Si-OH)，ν (SiO-OH)と表す。ν (Si-OH)はν (H<sub>2</sub>O in SiO<sub>x</sub>) とν (Free H<sub>2</sub>O)の間に現れDavisらの結果と一致する[2]。ν (SiO-OH)は1925 ~ 3049 cm<sup>-1</sup>なのでSiO-OHボンドは3000cm<sup>-1</sup>以下の吸収の候補である。従って過剰H<sub>2</sub>O分子，加水分解によるSi-OHボンド，過剰酸素反応によるSiO-OHボンドが吸収スペクトルブロード化の原因と考えられる。この低級酸化層中ではH<sub>2</sub>O分子・反応生成物の拡散が速く表面酸化が促進される。 [1] T. Oku, et al., CS MANTECH Conference, May 19th - 22nd, 2014, Denver, Colorado, USA, P179. [2] K. M. Davis and M.Tomozawa, J.Non-Cryst.Solids 201 (1996) 177 .

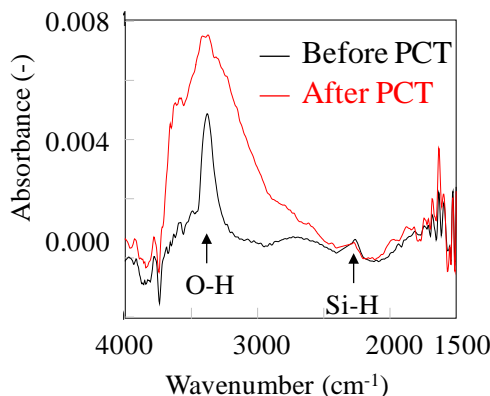


Fig. 1 FTIR absorption spectra for the SiO<sub>x</sub> films before and after PCT

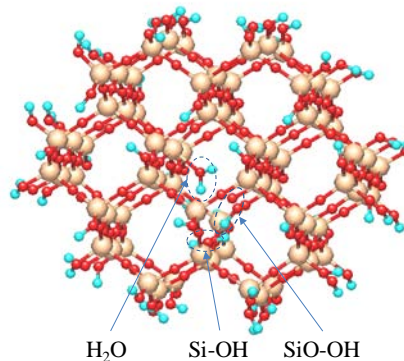


Fig. 2 Model cluster of an SiO<sub>x</sub>

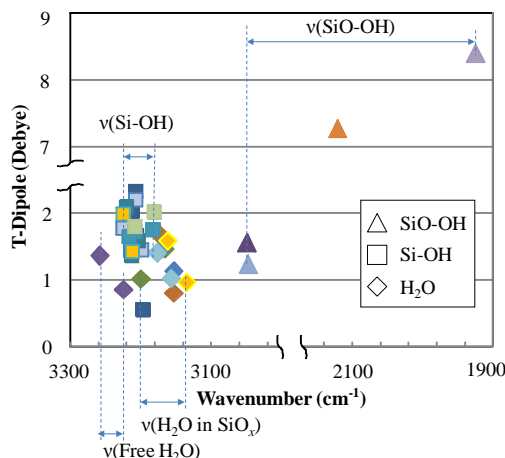


Fig. 3 Vibration of OH bonds in SiO<sub>x</sub> films