

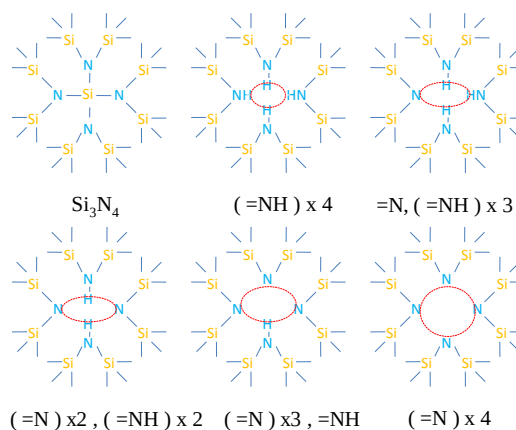
シリコン欠損を有する SiN_x 膜中への H_2O , HBr 分子の透過Penetration of H_2O and HBr molecules into SiN_x films with Si deficits

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($\leq 300^\circ\text{C}$)した保護膜中には欠損・欠陥が多いので耐湿性・耐ハゲン性への影響が懸念される．前回までにハゲン化水素(HX : $\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$)分子が H_2O 分子より Si_3N_4 膜中への透過障壁が小さく, N-H ボンド($=\text{NH}$), シリコンダングリングボンド($\equiv\text{Si}$), Si-H ボンド($\equiv\text{SiH}$)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 Si_3N_4 膜中に窒素ダングリングボンド($=\text{N}$)を含むシリコン欠損を導入し H_2O , HBr 分子の透過障壁 ΔE を計算し保護膜の耐性を分析する．

図 1 シリコン欠損($\circ$)の構造

計算： SiN_x 膜中の欠陥モデルは 10 原子層からなる Si_3N_4 クラスター分子の透過経路の中央部分のシリコン原子 1 個を欠落させシリコン欠損を形成した．更にシリコン欠損に隣接する $=\text{N}$, $=\text{NH}$ の数を変えて 5 種類の欠陥を作成した(図 1)．これらの欠陥を含む SiN_x 膜の表面から裏面に H_2O , HBr 分子を透過させ生成エネルギー ΔE を MO-G (MOPAC2002 ベースの半経験的分子軌道法)で計算した．

結果： H_2O 分子透過に関しては SiN_x 膜中の欠損位置($\uparrow$)での ΔE は $=\text{N}$ の数の増加とともに減少する(図 2)．更に, $=\text{N}$ の数が 4 のとき ΔE は欠損位置より裏面側で急増する．これは H_2O 分子が $(=\text{N}) \times 4$ 欠陥を通り抜け狭い経路に経路変更したためである．また, H_2O 分子のシリコン欠損 $(=\text{N}) \times 4$ 位置での ΔE は 1.8eV と前回報告の窒素欠損($\equiv\text{Si}$) $\times 3$ 位置での 3.0eV と比べると小さい．これはシリコン原子の方が窒素原子よりサイズが大きいためである． HBr 分子透過の場合も ΔE の欠損依存性は H_2O 分子と同じだが, ΔE が小さいことと欠損位置($\uparrow$)で ΔE が急減する点異なる(図 3)．これは HBr 分子の水素が SiN_x 膜の窒素と結合したためである．この様に $=\text{N}$ は分子透過に影響大だが, $=\text{NH}$ より数桁低密度なので $=\text{N}$ の影響は局所的だと考えられる．

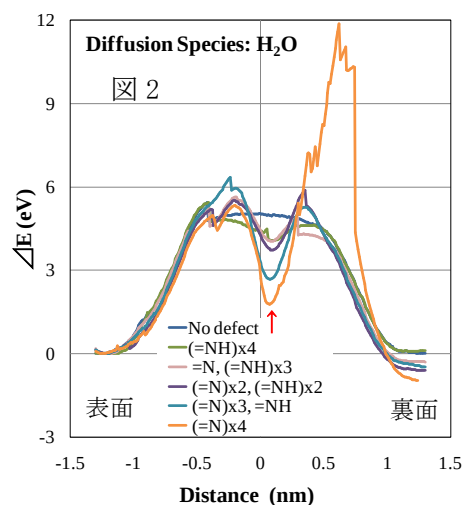


図 2

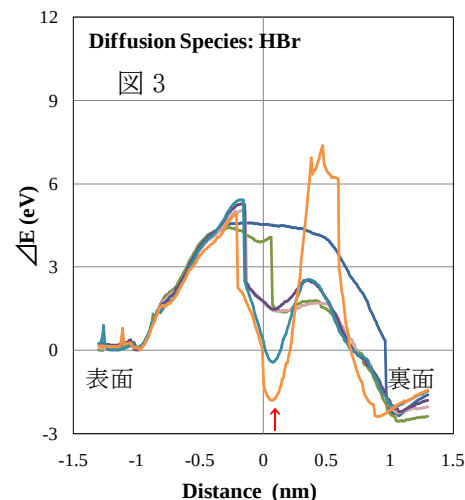


図 3