

# 第一原理計算による透明電極材料のエッチングにおける水素効果の解明

## First Principle Study on the Effects of Hydrogen on Transparent Conducting Oxide Etching

阪大院エレクトロニクス研究センター<sup>1</sup>, Karlsruhe Institute of Technology (KIT)<sup>2</sup>,

ソニーセミコンダクタソリューションズ (株)<sup>2</sup>

○李 虎<sup>1</sup>, Pascal Friederich<sup>2</sup>, Karin Fink<sup>2</sup>, Wolfgang Wenzel<sup>2</sup>, 唐橋 一浩<sup>1</sup>,

深沢 正永<sup>3</sup>, 長畑 和典<sup>3</sup>, 辰巳 哲也<sup>3</sup>, 浜口 智志<sup>1</sup>

Center for Atomic and Molecular Technologies, Graduate School of engineering, Osaka Univ.<sup>1</sup>,

Institute of Nanotechnology, Karlsruhe Institute of Technology (KIT)<sup>2</sup>,

Sony Semiconductor Solutions Corporation<sup>3</sup>,

○Hu Li<sup>1</sup>, Pascal Friederich<sup>2</sup>, Karin Fink<sup>2</sup>, Wolfgang Wenzel<sup>2</sup>, Kazuhiro Karahashi<sup>1</sup>,

Masanaga Fukasawa<sup>3</sup>, Kazunori Nagahata<sup>3</sup>, Tetsuya Tatsumi<sup>3</sup>, Satoshi Hamaguchi<sup>1</sup>

E-mail: lihu@ppl.eng.osaka-u.ac.jp

**【背景】**光電子デバイスの微細化の発展とともに、透明電極の更なる微細加工が要求されている。その微細化を実現するために、透明電極材料である ITO (tin doped indium oxide) や ZnO (Zinc oxide) のエッチング反応機構の解明が必要となる。前回、ビーム実験から CH<sub>x</sub> 系有機ガスを用いる ITO と ZnO のエッチングにおいて、CH<sub>x</sub> に含まれる水素は炭素の堆積を防ぎ、エッチング反応を促進する効果が明らかになった [1,2]。さらに、水素イオン照射により、水素含有層が形成され、エッチング反応に促進効果を与えることが明らかになった [2]。今回の研究では、水素含有層の形成とエッチングメカニズムの理解を目指し、第一原理計算を行うことにより、透明電極材料のエッチングにおける水素効果を定量的に評価した。

**【計算】**本研究では、TurboMole を用いて、Embedded Cluster 法を導入し密度汎関数法に基づく計算を行った。水素を含んだ ZnO (In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) クラスターモデルを構築し、水素イオン照射による水素含有層を再現し、その水素含有層に対して各原子の脱離過程におけるエネルギー変化を比較した。

**【結果】**右の表 1 は、水素含有の有無に対し ZnO 表面の各原子の Vacancy 生成エネルギーを表している。水素が入ることにより、Vacancy 生成エネルギーが減少したことが分かる。さらに、水素は酸素と結合し、OH を形成されることにより、Zn と O の結合が弱くなる、または切れる結果が得られた。これらの結果から ZnO の水素含有層はより物理的にスパッタされやすいことが分かる。本研究では、In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> に対しても、同様な計算を行った。

表 1. 水素含有の有無に対する Vacancy 生成エネルギーの変化

Vacancy 生成エネルギー(eV)			
ZnO		水素含有 ZnO	
Zn	O	Zn	O
7.1	6.6	3.6	4.8

[1]. 李, 唐橋, 深沢, 長畑, 辰巳, 浜口 : 第 76 回応用物理学会秋季学術講演会 15a-2Q-9

[2]. 李, 唐橋, 深沢, 長畑, 辰巳, 浜口 : 第 77 回応用物理学会秋季学術講演会 13a-B9-7