

プラズマ誘起ダメージを受けた局所構造の第一原理計算による解析

First-principles-based prediction of the local structures damaged by plasma exposures

京大院工¹ 吉川 侑汰¹, 江利口 浩二¹

Kyoto Univ.¹ Yuta Yoshikawa¹, Koji Eriguchi¹

E-mail: yoshikawa.yuuta.43e@st.kyoto-u.ac.jp

1. はじめに

半導体デバイス製造において、微細加工や薄膜堆積などでプラズマプロセスが用いられている。近年、デバイスの微細化によって、このようなプラズマプロセスでは、欠陥生成（プラズマダメージ）による信頼性劣化や歩留まり低下が問題となっている。プラズマダメージは、デバイスの電気特性変化を誘発させることが知られている[1]が、材料中での詳細な電子状態変化は分かっていない。古典的分子動力学法による解析では、電子状態変化は予測できないが、欠陥分布や機械特性変化に関して多くの知見が得られている[1,2]。一方、デバイスの電気特性変化を予測するには、電子状態変化を詳細に扱うことが出来る第一原理計算が有効であると考えられる。今回我々は、第一原理計算を用いて、プラズマダメージによる局所構造の電子状態変化を解析した。実プロセスで用いられる元素（Br, Cl）に起因する物理ダメージを想定し、代表的な材料（Si, SiO₂, Si₃N₄）中での電子構造の変化を電子状態密度（Density-of-State, DOS）を基に予測した。

2. 解析手法とモデル

第一原理計算は、Kohn-Sham 方程式（1）を数値的に解くことで、物質の電子状態を求める計算手法である[3]。 \hbar を Dirac の定数、 E_i , Ψ_i をそれぞれ固有エネルギー、固有波動関数として、

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{eff}} \right] \Psi_i = E_i \Psi_i \quad (i=1, \dots, N) \quad (1)$$

となる。ただし、 m , N は電子の質量と個数、 V_{eff} は有効ポテンシャルである。カットオフエネルギーを 200 Ry として、密度汎関数理論（PBE 汎関数近似）を用いて計算した。Fig. 1 に、今回対象とするセルの一例を示す。Fig. 1 は単結晶 Si の例であり、ここにプラズマプロセスで用いられる元素を挿入した。SiO₂ および Si₃N₄ の代表的な構造に対しても同様にセルを準備し、元素を挿入した。計算には Quantum-Espresso コード[4]を用いた。なお、DOS は構造最適化を施し求めた。

3. 計算結果

Fig. 2 に、計算から求めた DOS を示す。侵入した元素の種類に依存し、DOS 分布が異なっていることがわかる。Fig. 2(b)および 2(c)で示す絶縁膜であれば、求めた DOS はトンネルリーク電流増大の原因となるトラップ準位として働くと考えられる。（我々は実験結果から、Si₃N₄ 膜とトンネルリーク電流特性変動を観測している[5]。）これらの結果は、物理ダメージによる電気特性変化の様子がプラズマプロセス条件に依存することを示唆している。

4. おわりに

今回、物理ダメージによる Si, SiO₂, Si₃N₄ 中での電子構造変化を第一原理計算により検討した。DOS に基づく予測から、それぞれの電気特性変動がプラズマ条件に依存する可能性があることがわかった。今後、プラズマダメージ条件を考慮したデバイス設計が重要であると言える。

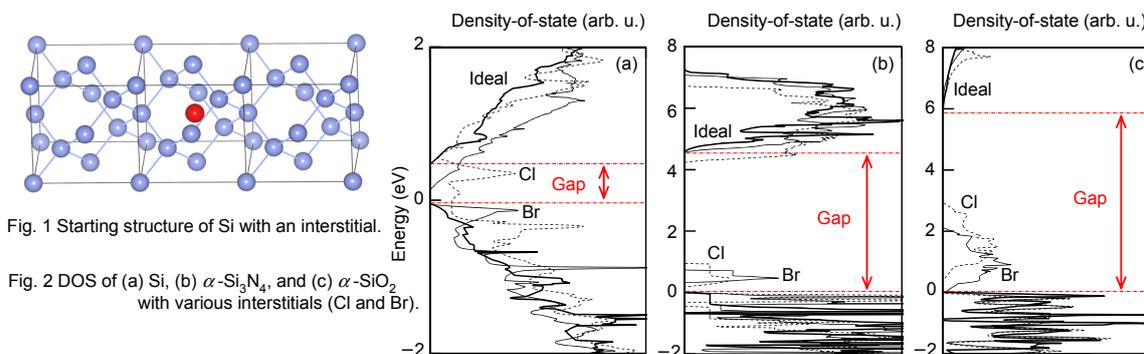


Fig. 1 Starting structure of Si with an interstitial.

Fig. 2 DOS of (a) Si, (b) α -Si₃N₄, and (c) α -SiO₂ with various interstitials (Cl and Br).

参考文献：[1] K. Eriguchi, J. Phys. D **50** (2017) 333001. [2] N. Kuboi et al., J. Vac. Sci. Technol. A **33** (2015) 061308. [3] W. Kohm and L. J. Sham, Phys. Rev. **140**, (1965) 1133. [4] P. Giannozzi et al., <http://www.quantum-espresso.org>, [5] Y. Yoshikawa et al., DPS p. 211 (2017).