

ハフニウムを添加したシリコン窒化膜の窒素原子空孔の欠陥準位

Defect level of nitrogen atom vacancy in hafnium-doped silicon nitride film

東海大学大学院 工学研究科 °(M2)新里健也, 小林清輝

Graduate School of Engineering, Tokai Univ., °K. Niisato, K. Kobayashi

E-mail: kkbys@keyaki.cc.u-tokai.ac.jp

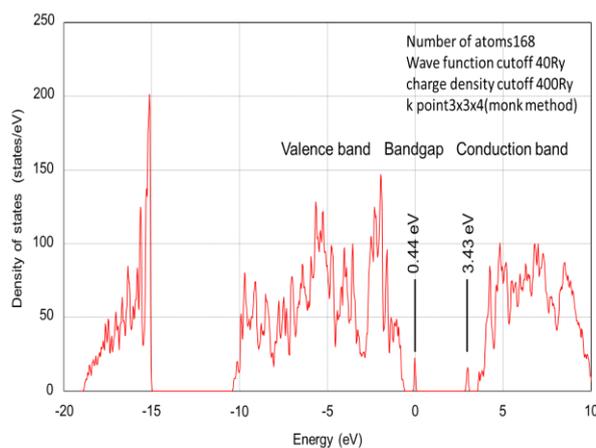
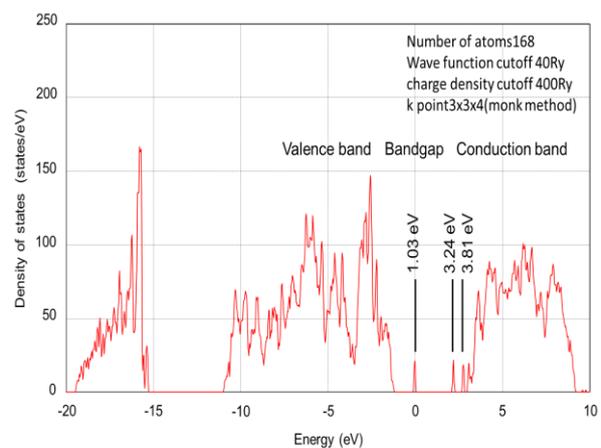
[はじめに] MONOS (Metal-Oxide-Nitride-Oxide-Silicon) 型不揮発性メモリでは、シリコン窒化膜中の点欠陥が作るトラップ準位にキャリア (電子または正孔) を捕獲することでデータを記憶する。そのため点欠陥の性質を理解し制御することが重要である。我々は、シリコンや窒素とは異なる元素をシリコン窒化膜に導入することによって点欠陥が形成するエネルギー準位がどのように変化するかについて注目している。シリコン窒化膜中には複数の種類の点欠陥が存在すると考えられており[1-3]、その中の一つに水素が結合した状態の窒素原子空孔 ($V_N(H)$ type 2) がある。本発表では、 $V_N(H)$ type 2 並びに $V_N(H)$ type 2 を構成するシリコン原子をハフニウムに置き換えた複合欠陥 ($V_N(H, Hf_{Si})$ type2) が作るエネルギー準位について第一原理計算を用いて調べた結果について報告する。

[計算に用いたモデル] β - Si_3N_4 結晶をもとに 168 原子から構成されるスーパーセル (以下、 $Si_{72}N_{96}$ と呼ぶ) を用意し、 $Si_{72}N_{96}$ に $V_N(H)$ type 2 又は $V_N(H, Hf_{Si})$ type2 を形成した。その後、各スーパーセルについて構造緩和を実施した。波動関数に対する平面波カットオフエネルギーは 40 Ry、電荷密度に対する平面波カットオフエネルギーは 400 Ry である。状態密度の計算には $3 \times 3 \times 4$ の一様 k メッシュを用いた。

[計算結果と考察] Fig. 1 に、 $V_N(H)$ type 2 を含むスーパーセルの DOS (Density of States) を示す。価電子帯上端から、0.44 eV 及び 3.43 eV の位置に欠陥準位が現れた。次に Fig. 2 に、 $V_N(H, Hf_{Si})$ type2 を含むスーパーセルの DOS を示す。価電子帯上端から 1.03 eV 及び 3.24 eV、3.81 eV の位置に欠陥準位が現れた。今後、ALDOS (Atomic Local Density of States) 及び PCD (Partial Charge Density) の計算を行い、各欠陥準位が点欠陥を構成するどの原子に起因するのかを調べる。

【謝辞】本研究に対し多くのご協力を頂いた太田 優一氏に感謝いたします。本研究は一部 JSPS 科研費 JP18K04244 の助成のもとに行われた。

【参考文献】 [1] C. Di Valentin *et al.*, J. Phys. Chem. C 115, 561 (2011). [2] K. Sonoda *et al.*, J. Appl. Phys. 117, 104501 (2015). [3] 新里健也, 小林 清輝, 第 82 回半導体・集積回路シンポジウム, P-03 (2018).

Fig. 1 $V_N(H)$ type 2 を含むスーパーセルの DOSFig. 2 $V_N(H, Hf_{Si})$ type 2 を含むスーパーセル