

SiN_x, SiO_x 膜へのアルカリ金属イオンの透過障壁のイオン半径依存性

Dependence of penetration barrier of alkali metal ions into SiN_x and SiO_x films on ion radius

三菱電機(株) ○奥友希, 戸塚正裕, 佐々木肇

Mitsubishi Electric Corporation, Tomoki Oku, Masahiro Totsuka and Hajime Sasaki

E-mail: Oku.Tomoki@ap.MitsubishiElectric.co.jp

はじめに:保護膜の耐湿性劣化へのイオンの影響を分析するために, 前報[1]では欠陥の無い Si₃N₄, SiO₂ 膜へのイオンの透過障壁 ΔE を分子軌道法(PM6 法[2])で計算した. そこでは, イオン半径が小さいほど ΔE が小さい傾向が見られたが, 陽イオンではその傾向は認められなかった. 本報では, この原因を解明するためにアルカリ金属イオン(Li⁺, Na⁺, K⁺, Rb⁺)が欠陥を有する SiN_x, SiO_x 膜に侵入する際の ΔE の計算を追加した.

計算:欠陥を有する SiN_x, SiO_x 膜のモデルクラスターはイオンの透過経路の Si, O, N 原子を除去/置換し, ダングリングボンド

は一部もしくは全てを水素終端して形成した. イオンの侵入深さ(Depth)とともに計算した ΔE は Fig. 1 に示す様に正・負の両ケースがあり, 欠陥位置での ΔE の最小値から生成エネルギー ΔH_d を求めた.

結果:SiN_x膜を透過するイオンの半径と ΔH_d の関係を Fig.2 に示す. ①Na⁺のイオン半径で ΔH_d が極小, ②シリコン空孔の N-H 終端が(NH)_nで n=4→0 と減ると ΔH_d が小さくなる. 次に, SiO_x膜でのイオン半径と ΔH_d の関係を Fig.3 に示す. ①Na⁺または K⁺のイオン半径で ΔH_d が極小, ②シリコン空孔の O-H 終端が(OH)_nで n=4→0 と減ると ΔH_d が小さくなり, 酸素空孔の Si-H 終端が(SiH)_{n=0,1,2}の方が ΔH_d が大きい傾向がある. つまり, イオン半径が小さいほど ΔE 小ではなく, 膜種や空孔により ΔE 小のイオンが異なるので, Si-N, Si-O 格子との静電相互作用による斥力だけでなく引力の影響が考えられる. [1] 奥, 戸塚, 佐々木, 第 81 回秋応物 11a-Z10-4, [2] MO-G Version 1.0.6, Fujitsu limited, Tokyo, Japan (2011).

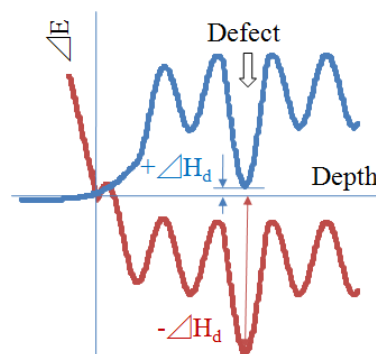


Fig. 1 ΔE during the ion penetration and the definition of ΔH_d .

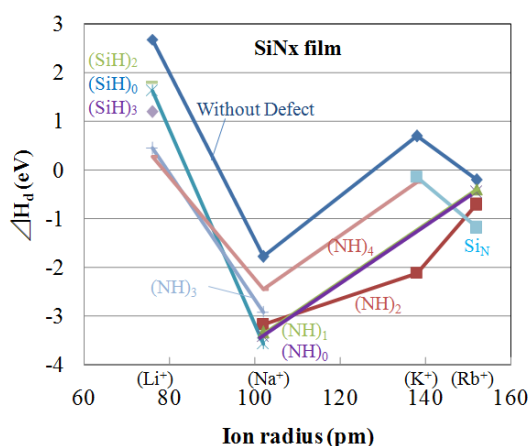


Fig. 2 Relationship between ion radius and ΔH_d during the penetration of ions into SiN_x films.

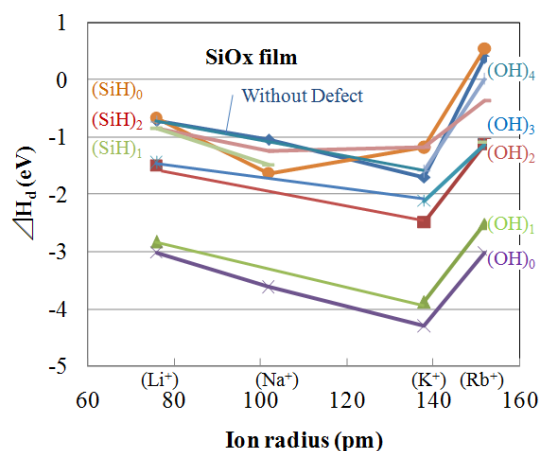


Fig. 3 Relationship between ion radius and ΔH_d during the penetration of ions into SiO_x films.