

SiO₂ 膜中欠陥への歪みの影響の理論検討

Theoretical Study of Strain Effect on Vacancies in SiO₂

島根大院自然科学 °(M1)西村 豪広, 影島 博之
Shimane Univ., °Takehiro Nishimura, Hiroyuki Kageshima
E-mail: n20m210@matsu.shimane-u.ac.jp

【はじめに】近年では平面型 MOSFET は立体型 MOSFET へと構造を変化させることでより優れた半導体としての役割を担うことが期待されている。しかし立体型 MOSFET へシフトするとゲート絶縁膜に歪みが生じる。歪みはゲート絶縁膜の信頼性にも影響を与えることが懸念される。

シリコン酸化膜をゲート絶縁膜として使った場合の信頼性には、シリコン酸化膜中の O 欠陥が重要な働きをしていると知られている。O 欠陥を持つシリコン酸化膜はバンドギャップ中に欠陥準位を作ると考えられており、これを介してリーク電流が流れる。これまで SiO₂ 結晶中の O 欠陥やそこへの H や OH の終端が研究されている[1,2]。H や OH による O 欠陥の終端は欠陥準位をなくすだけでなく、不十分な終端は欠陥準位を生じることがわかっている。

そこで本研究では、酸化膜の信頼性に対する歪みの影響を明らかにするため、O 欠陥を持つ SiO₂ 結晶中に H₂O 分子を固溶、H や OH が終端することで及ぼす影響を調べると共に、その歪み依存性を第一原理計算により検討した。

【計算方法】計算には、第一原理計算プログラムである PHASE を使い、スピン分極も考慮した。α 水晶の 2×2×2 のスーパーセルを使い、単位胞の大きさがそのままのものと、5% 圧縮させたものと 5% 拡張させた 3 種類を調べた。

【結果】無歪みの場合、O 欠陥が作り出したダングリングボンドの終端に完全に成功した構造は 2 種類見つかった。そのうち一つは以前報告されているもの[2]と同じであった(Type I)が、もう一つは以前の報告にも見られないもので、同じ Si 原子を H と OH が同時に終端している(Fig 1, Type II)。バンド分散関係よりこの 2 種類での欠陥準位は確認できなかった。しかし、Si-H 結合から H を取り除くと、Type I からでも(Type III)、Type II からでも(Type IV)バンドギャップの中心付近に欠陥準位が確認できた(Fig2)。これは Si にダングリングボンドができたからである。

次に圧縮した場合、無歪みと同様に欠損部が終端された構造が 2 種類確認でき(Type I, II)、この 2 種類での欠陥準位は確認できなかった。無歪みと同様、H を取り除いて計算を行った結果は 2 種類(Type III, IV)ともバンドギャップの中心付近で欠陥準位が確認できた。形成エネルギーは無歪みの場合と比較すると、Type I では 1.30eV、Type II では 1.59eV、Type III では 0.69eV、Type IV では 1.54eV 不安定となる結果が得られた。

拡張した場合も同様で、無歪み同様のダングリングボンドを持たない構造が 2 種類確認できた(Type I, II)。また、この 2 種類での欠陥準位は確認できなかった。H を取り除いて計算を行った結果は 2 種類(Type III, IV)ともバンドギャップの中心付近で欠陥準位が確認できた。この時の形成エネルギーは無歪みの場合と比較すると、Type I では 1.76eV、Type II では 1.69eV、Type III では 1.49eV、Type IV では 1.63eV 安定となる結果が得られた。

以上の形成エネルギーの変化から考えると、圧縮されることで酸化膜には欠陥ができにくくなりリーク電流も流れにくくなる、逆に拡張されることで欠陥ができやすくなりリーク電流も流れやすくなる、と考えられる。

今後はクリストバライトの場合と帯電効果を調べる予定である。

[1] Oshiyama, JJAP37, L232 (1998).

[2] Yokozawa et al., Tech. Dig. IEDM, 703 (1997).

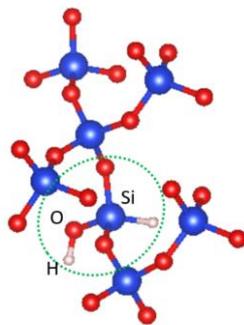


Fig. 1 Atomic structure of Type II

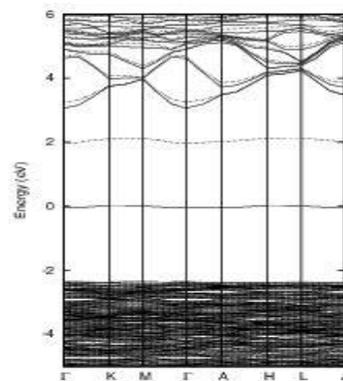


Fig. 2 Band structure of Type IV