プラズマ曝露により形成される材料中の局所構造解析
Analysis of local structures in plasma-damaged materials

京都大学大学院　工学研究科　航空宇宙工学専攻　推進工学分野　　占部　継一郎

研究成果概要

プラズマプロセスは電子デバイスの微細加工に不可欠であるが、プロセス中に固体表面に照射される高エネルギーイオンは材料の物性変化を引き起こし、デバイス性能劣化の原因となることが知られている[1]。我々は、これまで様々な材料を対象に、プラズマ曝露により生じる局所的な構造変化（欠陥）や欠陥を含む材料の電子エネルギー準位分布を解析してきた[2]。

本研究では、組成比（Si/N 比）により幅広い特性制御が可能な SiN 材料[3]を対象とした解析を行った。化学量論比である Si_3N_4、および Si 原子を多く含む Si-rich SiN を対象に Ar プラズマ曝露による局所構造変化とその電子エネルギー準位分布を解析した。解析は密度汎関数理論[4]に基づく第一原理計算コード Quantum-Espresso[5]を用いた。

Fig. 1(a)に本研究で解析した計算モデル例を示す。β-Si_3N_4 構造の Si または N の原子数を増減（Si-in, N-out）させることで、Si-rich SiN 構造を作製した。各構造中に Ar 原子を挿入し、格子間原子型の欠陥を模擬した。各構造の Ar 挿入による電子状態密度（DOS）変化を Fig. 1(b)に示す。Ar 挿入により、Si_3N_4 ではバンドギャップが小さくなり（バンド端での準位形成）、Si-rich SiN ではバンドギャップ中に準位が形成されることが分かった。以上の結果から、SiN 材料ではプラズマ曝露による影響が Si/N 比により異なることが示唆され、電子デバイス作製における材料・プロセス設計に有用な知見が得られた。

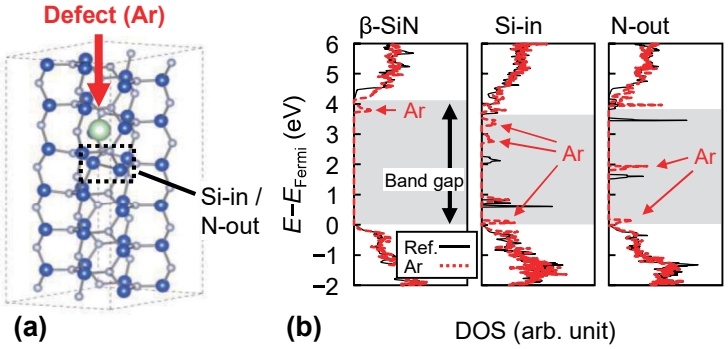

Fig.1(a) A starting structure of SiN with Ar interstitial, (b) DOS of various SiN structures before and after Ar insertion.

参考文献 [1] K. Eriguchi, Jpn. J. Appl. Phys. **60**, 040101 (2021). [2] Y. Yoshikawa and K. Eriguchi, Jpn. J. Appl. Phys. **57**, 06JD04 (2018). [3] W. L. Warren *et al.*, Appl. Phys. Lett. **59**, 1699 (1991). [4] W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. **140**, 1133 (1965). [5] P. Giannozzi *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter. **29**, 465901 (2017).