

分子動力学シミュレーションによる $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ 界面の ダイポール層の再現

Dipole Layer Formation at $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ Interface Reproduced by Molecular Dynamics Simulation

早大理工¹, 早大ナノ機構², 明大理工³, 兵庫県立大⁴, JST-CREST⁵,

○栗山亮¹, 橋口誠広¹, 高橋隆介¹, 小椋厚志^{3,5}, 佐藤真一^{4,5}, 渡邊孝信^{1,2,5}

Waseda Univ.¹, Waseda-INN², Meiji Univ³, University of Hyogo⁴, JST-CREST⁵,

R. Kuriyama¹, M. Hashiguchi¹, R. Takahashi¹, A. Ogura^{3,5},

S. Satoh^{4,5}, and T. Watanabe^{1,2,5}

E-mail: kuriyama@watanabe.nano.waseda.ac.jp

【はじめに】 high-k/ SiO_2 界面に形成されるダイポール層によって、high-k/メタルゲートを用いる FET のしきい値電圧がシフトすることが知られている。この現象を説明するモデルとして、O 原子密度が高い層から低い層へ O イオンが移動することによりダイポール層が形成されるというメカニズムが提案されている[1]。しかし、このダイポール層の原子論的構造、ならびにその形成メカニズムの微視的描像は明らかにされていない。そこで本研究では、分子動力学法を用いて $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ 積層構造のシミュレーションを行い、界面におけるダイポール層形成の再現を試みた。

【シミュレーション方法】 SiO_2 結晶と Al_2O_3 結晶のモデルをそれぞれ 4000K の定温分子動力学計算によりアモルファス化させ、続いて両構造を張り合わせて再び 1000K の熱処理を加えることで、図 1 に示すような $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ 界面構造モデルを作成した。モデルのサイズは $3\text{nm} \times 4\text{nm} \times 22\text{nm}$ で、これを単位構造として 3 次元周期境界条件が課されている。長手方向に SiO_2 層と Al_2O_3 層が積層されており、これを z 軸と定義した。 $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ 積層構造は 1000K、1atom の定温一定圧下で 10ps 保持し、その徐々に 300K に冷却させた。圧力は単位胞の z 軸方向の長さを調節することで制御した。原子間相互作用モデルとして、単純な 2 体イオン相互作用を表現する Born-Mayer-Huggins ポテンシャルを採用した[2]。Si、Al、O イオンの電荷はそれぞれ $1.89q$ 、 $1.4175q$ 、 $-0.945q$ であり (q は素電荷)、この電荷分布を解析し、界面ダイポールの形成を調べた。

【シミュレーション結果】 熱処理後の $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ 積層構造の z 軸に沿った電荷密度分布を図 2 に示す。 $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ 界面において SiO_2 側で負電荷、 Al_2O_3 側で正電荷が増加していることから、界面ダイポールが発生していることがわかる。ダイポールは O 原子の面密度が低い SiO_2 から高い Al_2O_3 に向いており、これは先行研究[1]の見解と一致する。シミュレーションで得られた $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ 界面付近の構造変化は複雑であり、界面近傍の約 1.5nm の厚さにわたって O 原子だけでなく、Si および Al 原子も変位していたが、統計的に O 原子の変位量が最も大きく、これがダイポール層形成の主要因であると考えられる。今後、 Al_2O_3 以外の high-k 絶縁膜についても同様の解析を行い、O 原子の動きとダイポール層形成の関係を明らかにしていく。

【謝辞】本研究は JST-CREST の支援によって行われた。

[1] K. Kita et al., APL 94, 132902 (2009). [2] M. Matsui, Phys Chem Minerals, 23, 345 (1996).

