

$\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ 界面のダイポールが誘起するチャネル内の静電界 Electrostatic field in channel induced by the dipole layer at $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ interface

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,○橋口誠広¹, 栗山亮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 Univ.³, University of Hyogo⁴, JST-CREST⁵,○M. Hashiguchi¹, R. Kuriyama¹, R. Takahashi¹, A. Ogura^{3,5},S. Satoh^{4,5}, and T. Watanabe^{1,2,5}

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

[研究背景] シリコン系太陽電池の更なる低コスト化のためシリコンウエハの薄層化が進められており、比表面積の増大とともに表面再結合の抑制が重要な課題となっている。パッシベーション膜としては熱酸化膜(SiO_2)が最も優れているが、 Al_2O_3 を堆積させても優れたパッシベーション効果があることが知られている[1,2]。 Al_2O_3 膜と界面 SiO_2 層の界面付近に生じる負の固定電荷が表面再結合の抑制に寄与していると考えられているが、その詳細は不明である。一方、high-k/メタルゲートを用いる FET では、しきい値シフトを引き起こす要因として high-k/ SiO_2 界面のダイポールの広く存在が知られており、シリコン系太陽電池における Al_2O_3 膜の優れたパッシベーション効果と関係があるのではないかと筆者らは考えている。そこで本研究では、 $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ 界面のダイポール層が界面近傍のキャリアにどのような影響を及ぼすか、原子論的シミュレーションを用いて検討した。

[シミュレーション手法] $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ 界面モデルを分子動力学シミュレーションで作成し、界面における O イオンの移動により生じたダイポール層[3]によって、Si 基板内にどの程度の静電界が生じるか計算した。理想的な電気二重層の外側では電界は生じないことになっているが、 $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ 界面に生じるダイポールは離散的に分布しているため、その近傍では電界が浸み出していると考えられる。図 1 に、本研究で作成した $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 積層構造を示す。モデルの大きさは $20\text{Å} \times 40\text{Å} \times 12\text{Å}$ で、x-y 方向に 2 次元周期境界条件を設けた。系全体で電荷中性が保たれているが、 $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 界面で負の電荷を帯びた O イオンが SiO_2 側に移動しダイポールが形成されている。この絶縁膜の下 Si 基板内の電子に加わる Coulomb 力の z 方向成分を各点で計算した。

[結果と考察] 図 2 は、Si/ SiO_2 から深さ 4Å の位置の Coulomb 力の面内分布を示す。青色は基板奥側に向いた力を示しており、全体として絶縁膜から反発力を受けていることがわかる。図 3 は、Coulomb 反発力の深さ方向のプロファイルを示している。ダイポール層から受ける反発力は、図 2 中に黒丸で示した 9 点の平均値である。比較対象として $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ 界面に置いた負の素電荷から受ける Coulomb 反発力も示している。図 3 より、1 個の固定電荷から生じる力より大きな反発力がダイポール層から生じていることが分かる。この結果は、固定電荷でなくとも、high-k/ SiO_2 界面に生じるダイポールで表面再結合の抑制を説明できることを示している。

[謝辞] 本研究は JST-CREST の支援を受けて実施された。

[参考文献] [1] H. Lee et al., APL 100, 143901 (2012). [2] K. Arafune et al., JJAP 51, 04DP06 (2012). [3] K. Kita et al., APL 94, 132902 (2009).

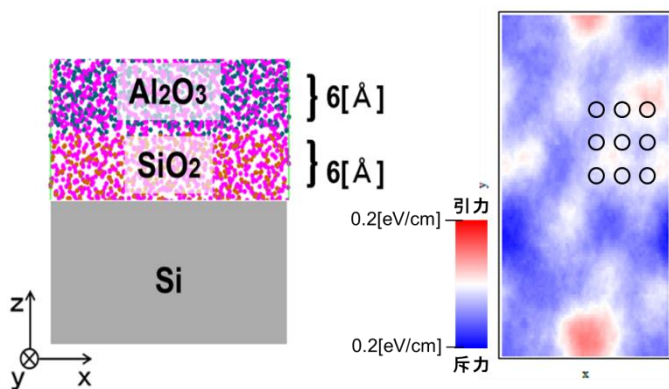


図 1 シミュレーションモデル

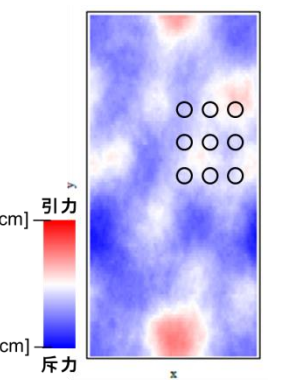


図 2 クーロン力分布濃淡図

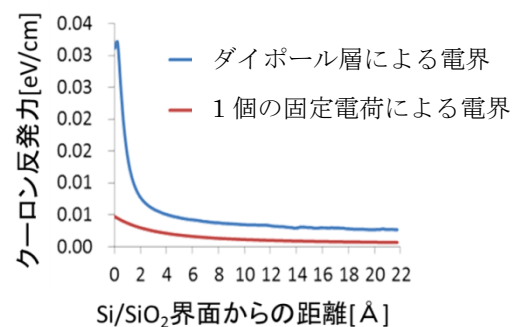


図 3 ダイポール層及び固定電荷から受けるクーロン反発力