Persistent Homology を用いたアモルファス SiO_2 膜の構造解析

Persistent Homology Analysis of Amorphous SiO_2 Thin Film

早大理工, 学振 PD ○テイ チュウ [1], 寺田拓哉 [1], 富田基裕 [2], 渡邉 孝信 [1], 小山 晃 [1]
Waseda Univ., JSPS Research Fellow ○C. Zheng[1] , T. Terada, M. Tomita, T. Watanabe[1], A. Koyama[1]
E-mail: engzhengchong@ruri.waseda.jp

【研究背景】Si 熱酸化膜を始めとしてアモルファス構造を有する絶縁膜は半導体デバイスの重要な構成要素であるが、無定形のアモルファス構造を特徴づける方法は限られており、構造分析は容易でない。本研究では、分子動力学シミュレーションで作製した SiO_2/Si 界面構造を対象として、persistent homology という代数トポロジーを用いた解析を試みた。Si 表面の熱酸化膜の成長速度は Deal-Grove 理論[1]によって説明されてきたが、乾燥雰囲気中の酸化の初期に見られる Deal-Grove 理論の予測からのズレの原因が、近年の研究で SiO_2/Si 界面近傍の歪みを帯びた構造遷移領域にあることが示唆されている[2][3]。本研究では、界面近傍の構造が persistent homology 解析でどのように特徴づけられるかに注目して調査を行った。

【計算方法】用いた SiO_2/Si 界面モデルを Fig.1 に示す。Si 結晶領域を Region A、界面から 1nm 以内の a-SiO_2 領域を Region B、表面から 1nm 以内の a-SiO_2 領域を Region D として persistent homology を計算した。１次元 persistent homology の計算結果(persistent 図)を Fig.2 で表した。Homology 論は代数的トポロジーにおける重要な概念であり、空間の幾何学的性質を代数構造に置き換えて分析することができる。homology 群を計算するソフトウェアが開発され、コンピュータで効果的に計算する手法が知られている。n 次元 Homology 群の生成元はそれぞれ図形にある n 次元の穴に対応している。原子配置の座標データを alpha 複体という幾何モデルに置き換えて、位相空間を構成する。さらに原子の成長を幾何モデルの半径を増やすことで対応させ alpha 複体の増大列（filtration) を構成する。persistent homology 群および persistent 図はその filtration から次数付き homology 群を計算し、その生成元が”穴”の発生時刻と消滅時刻を座標として表示するものである。穴の有無、個数、大きさが求められ、物質の生成過程をトポロジーの立場から視覚化することができる。このことにより０次元の生成元は連結部分、１次元の生成元はリング（輪)、２次元の生成元は空洞の様相に対応している。

【計算結果】ダイヤモンド型 Si 結晶には２種類の１次元の穴があり、Region B と Region D におけるそれらの１次元の穴の形と大きさを分析した。Fig.2 において Region A に存在する生成半径 1.2Å 程度の穴は６員環を示しており、０次元 Betti 数(生成元の数)の推移図と Fig.2 で Si 結晶の Si-Si の距離は SiO_2 の Si-Si の距離と違うことが分かった。また、Region D には「大きい穴」が多いことがわかった。それらの塊の消滅時刻(縦軸)の区間が Si より長いので、Region D に現れる「大きい穴」は６個ではなく７個または８個の原子によって構成される穴と考えられる。発生時刻(横軸)が 1.8Å から 2.2Å の区間のデータを観察すると、その区間にある穴の消滅時刻は前述の大きな穴の消滅時刻とは異なっている。よって、この区間の穴は「小さい」と考えられる。青の点の数の方が多いので、Region D より Region B の区域に小さな穴が多いことがわかった。

【参考文献】[1]. B. E. Deal, A. S. (1965) Grove General Relationship for the Thermal Oxidation of Silicon. Journal of Applied Physics [2]. Ohta H, et al. (2008) Potential Energy Landscape of an Interstitial O2 Molecule in a SiO_2 Film near the SiO_2/Si(001)Interface. Phys. Rev. B 78. 155326 [3]. Watanabe T, et al. (2006) New Linear-Parabolic Rate Figure Equation for Thermal Oxidation of Silicon. Phys. Rev. Lett. PRL. 96, 196102

Fig. 1 Si/SiO_2 model

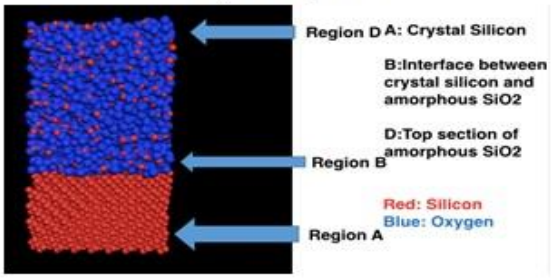
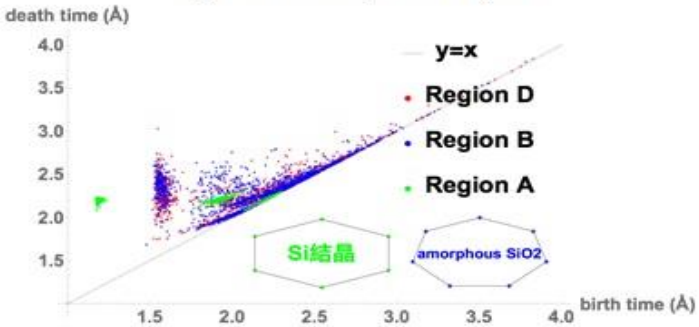


Fig. 2 One-dimensional persistence diagram



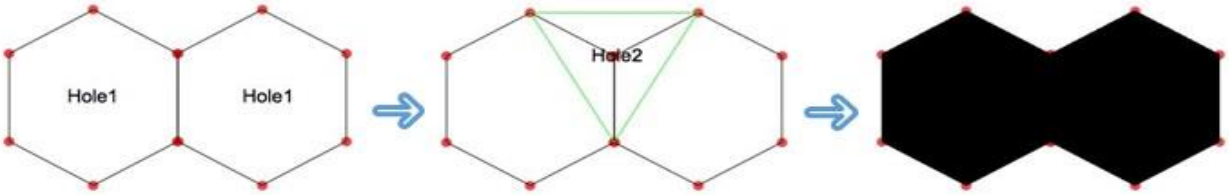


Fig. 3 Change of one-dimensional holes