SiO_2 のカリウム不純物の原子構造と電子構造

Atomic and Electronic Structures of K impurities in SiO_2

名大院工 [1]，名大未来研 [2]　○宮島 岳史 [1]，白川 裕規 [1]，洗平 昌晃 [2,1], 白石 賢二 [2,1]

Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.[1], IMaSS, Nagoya Univ.[2],

°Takeshi Miyajima[1], Hiroki Shirakawa[1], Masaaki Araidai[2,1], Kenji Shiraishi[2,1]

E-mail: miyajima@fluid.cse.nagoya-u.ac.jp

１．はじめに

製造過程で生じる MOSFET の金属汚染はその信頼性に関る深刻な問題である。例えば、絶縁膜中に混入した Na や K などの金属は絶縁膜中でイオン化する結果、ゲート電圧を印加した際に膜中を移動し、絶縁破壊や閾値電圧を変化させるなど信頼性を劣化させる事が知られている [1,2]。一方、近年ではそのような絶縁体中の金属原子の拡散現象を機能的に利用するデバイスの研究も行われている。例えば、振動型 MEMS 発電デバイスの固体イオンエレクトレットの作成には SiO_2 中に混入したカリウム原子が利用されている[3]。しかし SiO_2 中に電荷を蓄える要因は未だはっきりと分かってはいない。そこで本研究では、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を用いて、カリウム原子が混入した際の SiO_2 の構造と荷電状態を解析し、固体イオンエレクトレットの原理を明らかにする。

２．モデル及び計算手法

計算では系の全エネルギーや電子状態は、密度汎関数法に基づく第一原理計算コードである Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP)[4]を用いてモデル作成を行った。初期モデルとして密度 2.65g/cm^3 の 144 原子 SiO_2(α quartz)ユニットセルにカリウム原子 1 個と水素原子 1 個を配置し構造最適化計算を行った。その過程で、まず SiO_2 中のいくつかの箇所にカリウム原子を配置したモデルを計算し、その中で全エネルギーが最も低くなったものをモデルとして採用した。次に水素原子をカリウム原子近傍の Si-O 結合間に配置し、計 16 箇所の場合で再度構造最適化計算を行った。そしてそのモデルに対して、カリウム原子を取り除いて、異なる荷電状態での計算を行ない安定な荷電状態の検討を行う。

３．計算結果と考察

まず、SiO_2 に混入した際のカリウム原子の荷電状態を Bader Charge[5]を用いて解析した。その結果、混入したカリウム原子は+0.8 の荷電状態をとり、周辺の原子に電子を供給しカリウムイオンになっていることがわかった。次にカリウム周辺の Si-O 結合に水素を配置し構造最適化計算を行った結果、Fig.1 に示すように 3 種類の結合タイプをとった。それらの結合タイプのうち Type2 が最も全エネルギーが低く、安定な構造であった。3 種類の結合にはそれぞれダングリングボンドがある。カリウム原子の荷電状態は+1 であることから、水素挿入後に生じたダングリングボンドにカリウムから電子が供給され、SiO_2 中に蓄えられる。それにより SiO_2 がエレクトレットになると考えられる。

先行研究では電場を印可した際、カリウム原子が移動した。さらにカリウム原子が無くなった SiO_2 周りの領域は負に帯電しているとされている[6]。そこで、講演では 3 種類の構造からカリウム原子を取り除いた場合の原子構造や電子構造についても報告する。そしてそれらの構造について異なる荷電状態での安定性の考察を行うことで、エレクトレットの原理を明らかにする。

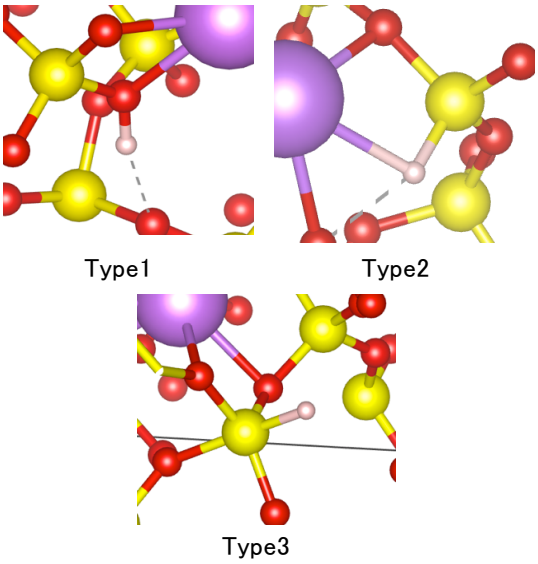

Fig.1 SiO_2 models with a potassium and a hydrogen atom. The yellow, red, white, and purple balls are Si, O, H and Potassium atoms, respectively.

Reference

[1] S. I. Raider, *et al.*, J. Electrochem. Soc. **120**, 425 (1973).

[2] S. M. Sze and K. K. Ng, Physics of Semiconductor Devices, 3rd ed. (Wiley-Interscience, 2006).

[3] M. Suzuki, *et al.*, JJAP **55(10)**, 107201 (2016).

[4] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **47**, 558 (1993).

[5] W. Tang, *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 084204 (2009).

[6] G. Hashiguchi, *et al.*, AIP advances **6**. 035004 (2016).

© 2018年 応用物理学会