

格子定数の変調による SiO₂ 中の Vo 拡散障壁の変化の研究

Study of Vo diffusion barrier in SiO₂ with lattice constant modulation

島根大院自然科学 (M1) 矢田 航平, 影島 博之

Shimane Univ. Kohei Yata and Hiroyuki Kageshima

E-mail: n18m223@matsu.shimane-u.ac.jp

【はじめに】縦型の FET は従来の MOSFET より集積度が上がると期待され、研究が進められている。Si 酸化膜界面には O 原子欠損 (Vo) が発生し、このとき発生した Vo が酸化膜の性質に影響を及ぼすことが知られているが[1]、縦型 MOSFET では酸化膜に様々な応力が発生する。そこで本研究では、SiO₂ 中の O 原子が欠損して起こる影響に着目し、応力の効果を調べるために格子定数を変調したときの拡散障壁の変化の検討を行った。

【方法】SiO₂ 結晶 (α -Quartz, α -Cristobalite) の Vo のある 2×2×2 原子モデルを準備した。拡散障壁を求めるには計算プログラム PHASE による neb 法を使った。最適な格子定数を 1 倍とし、格子定数を 0.9 倍から 1.15 倍の範囲で変えて拡散障壁の変化を求めた。

【結果】 α -Quartz と α -Cristobalite 1 倍での拡散障壁はそれぞれ 4.56eV, 4.36eV となった。過去の Munde 等の第一原理計算の報告には 4.6eV[2]とあり、今回の計算結果と矛盾しない。

Fig.1 に 1 倍での α -Cristobalite の拡散障壁の結果を示す。レプリカ数を 9 としたところ 5 番目のレプリカに障壁が現れた。圧縮すると障壁が低下し、拡張すると上昇することが分かった。 α -Quartz も α -Cristobalite と同様の傾向を示した。しかし、 α -Quartz の場合 1.15 倍すると、1 倍での 4.56eV から 1.26eV も下がっている。これは、拡張しすぎて α -Quartz から β -

Quartz に構造相転移が起こったためである。

次に、格子定数を変調したときの Si-O の結合長に注目した。1 倍の α -Quartz では初期位置の結合長が 2.67 Å であり、障壁の位置の結合長が 1.56 Å であった。格子定数を変化させると、初期位置では 0.68 Å の変化があったのに対し、障壁の位置では 0.016 Å ほどしか変化せず、距離がほぼ変わらなかった。つまり変調することで初期位置の Si-O 結合長は変化するが、障壁位置ではほぼ変化しない。このことは α -Cristobalite でも同様であった。したがって、障壁の高さの変化は初期構造のエネルギー安定性の変化によって支配されているといえることができる。

Fig.2 に α -Quartz と α -Cristobalite の原子密度と障壁の高さの関係を示す。横軸を原子密度にすることによって α -Quartz と α -Cristobalite を同グラフ上で比較できる。結晶構造は違うが障壁の高さは高密度側ではそれほど変わらない。この傾向は、SiO₂ 結晶中の O₂ 分子の拡散障壁の計算の報告と一致している[3,4]。

[1] H. Kageshima et al., Jpn. J. Appl. Phys. **45**, 694 (2006).

[2] M. S. Munde et al., J. Phys. Condens. Matter **29**, 245701 (2017).

[3] T. Akiyama et al., Jpn. J. Appl. Phys. **44**, 7427 (2005).

[4] T. Akiyama et al., Thin Solid Films **508**, 311 (2006).

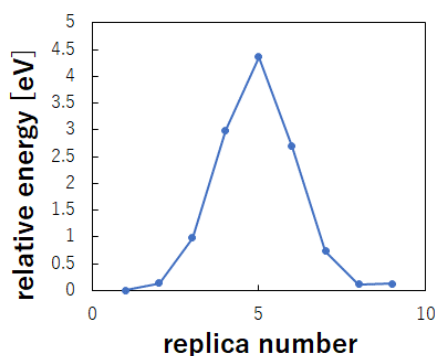


Fig.1 1 倍の α -Cristobalite の拡散障壁の計算結果

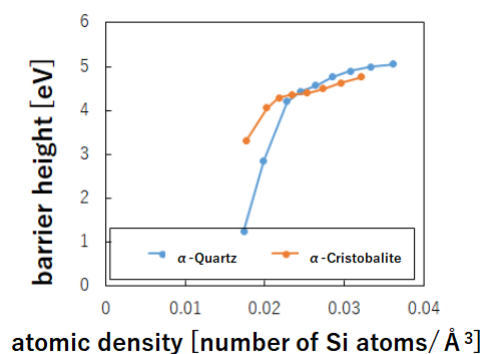


Fig.2 原子密度と障壁の高さの関係