

# 金属-酸化物界面の結合予測システム InterChemBond

## System for Predicting Interface Chemical Bond at Oxide-Metal Interfaces

物材機構, °吉武 道子

NIMS, °Michiko Yoshitake

E-mail: yoshitake.michiko@nims.go.jp

金属-酸化物界面は、CMOS のゲート電極-ゲート絶縁膜界面などのような電極-デバイス材料界面における動作電圧・消費電力の制御や、耐熱性コーティングのような界面濡れ性の制御など、様々な場面で重要である。金属と酸化物の界面は、同一材料間の界面においても、金属と結合するのが酸化物中の酸素原子か酸化物構成金属かの2種類の結合がありうる。この結合の違いにより、デバイスにおける動作電圧や濡れ性が大きく異なっていることが分かっている。著者らは、超高真空中における実験とその考察により、アルミナと金属及びアルミ含有合金の界面 [1,2]、酸化亜鉛と金属の界面 [3]の結合について、金属が酸化物中の酸素原子か酸化物構成金属のいずれと結合するのが熱力学的に安定かを予測する汎用的方法を開発してきた。現在、そのような予測方法をソフトウェアとして実装して公開しており [4]、国内外で年間約 200 ユーザーに利用されている。

図に示したのが現在の予測システムの初期動作画面である。1 は、純金属 M と酸化物 AO (酸化物構成金属 A) との界面結合予測、3 は、合金 (金属  $M_A$  に金属  $M_B$  を添加) と酸化物 AO との界面結合予測である。グレー掛けになっている、2 の界面反応を考慮した場合の予測については、予測方法が未完成で未実装であった。今回その部分の予測方法の開発と、実装を行ったので報告する。

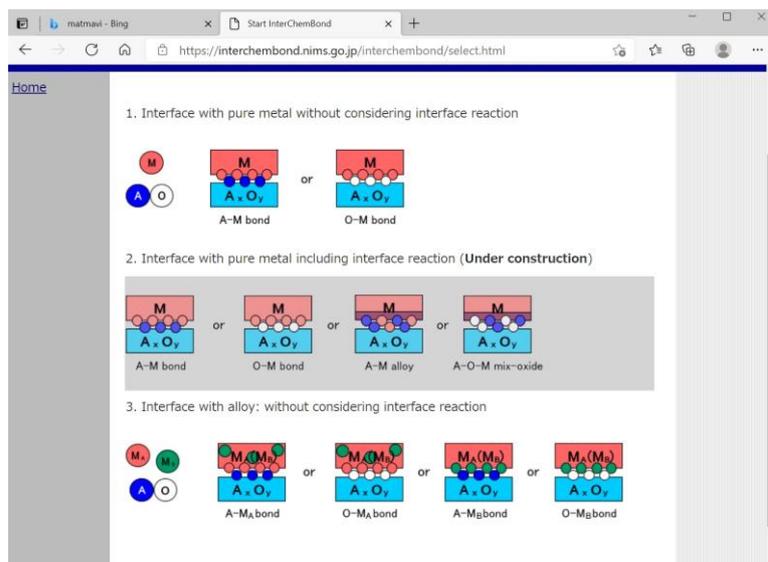


図 界面結合予測システム InterChemBond の現在の動作画面

[1] Michiko Yoshitake, Shinjiro Yagyū, Toyohiro Chikyow, J. Vac. Sci. Technol. A 32, 021102 (2014).

[2] Michiko Yoshitake, Shinjiro Yagyū, Toyohiro Chikyow, International Journal of Metals, 2014, 120840 (2014).

[3] Michiko Yoshitake, J. Vac. Sci. Technol. A 39, 063217 (2021).

[4] InterChemBond: <http://interchembond.nims.go.jp/>