

氏名(本籍)	清 ^し 水 ^{みず} 共 ^{とも} (茨城県)		
学位の種類	博士(工学)		
学位記番号	博甲第3920号		
学位授与年月日	平成18年3月24日		
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当		
審査研究科	数理解物科学研究所		
学位論文題目	原子スケールのSi薄膜とAl/Si界面の第一原理的評価		
主査	筑波大学教授	理学博士	名取研二
副査	筑波大学教授	工学博士	山部紀久夫
副査	筑波大学助教授	Ph. D.	佐野伸行
副査	筑波大学助教授	理学博士	白石賢二
副査	電気通信大学教授	理学博士	名取晃子

論文の内容の要旨

21世紀の情報技術(IT)は、そのハードウェアを構成するシリコンLSI技術に支えられて発展を続けている。シリコンLSIを構成する半導体素子も、半世紀にわたる微細化技術の進展の結果数桁の微細化を遂げて、いまやナノスケールに突入し、半導体素子技術もナノテクノロジーの時代を迎えた。半導体素子は、異なる材料の接触や界面構造に形成・成立するものが多い。従来の考え方では、素子の特性は一様な性質を有するいわゆる“バルク材料”を用いて構造を構成したと考え、界面にいたるまで“バルクの性質”が保持されると近似して、その特性を解析してきた。しかし、実際は界面近くの少なくとも数原子層は、バルクと異なる“界面の性質”に支配されることは明白である。素子の構造もナノスケールのサイズとなり、界面近くの数原子層の性質を正しく取り入れないと、ナノスケールの素子を正しく解析できない状況になってきている。界面近くの、ナノスケールのオーダーでの材料的・電気的特性の評価は、最近著しい進展を見せている計算科学の一分野である“第一原理計算”手法を用いて行なうのが、もっとも信頼性が高い。本論文では、シリコンの薄膜構造、およびシリコン素子中の代表的界面のひとつのシリコン-アルミニウム界面について第一原理計算を用いて解析し、誘電的性質、静電遮蔽、界面の特性、面方位依存性などを議論している。用いたソフトは、Si, Al, Hに対してノルム保存型の超ソフト擬ポテンシャルを使用し、交換相関ポテンシャルにGGAを用いたTAPPと呼ばれるコードを用いて計算している。また、薄膜への電界の印加方法も、直接ダイポール層を真空中において鋸歯状のポテンシャル・プロファイルを実現し、摂動と異なり高次の電界効果まで取り込んだ結果を得ている。

Al薄膜に電場を印加した場合に誘起される電荷分布は、表面から約1Å離れた位置にピークを持ち3Å程度の広がりを持つことがわかった。Alの金属的な性質による静電遮蔽は、一原子層膜厚のAl薄膜でも完全に遮蔽効果を示す結果が得られた。Al薄膜の仕事関数は、膜厚の変化に伴って最大で0.8 eVもの変化を示すことが見られた。

Si薄膜の誘電特性を調べた。膜厚が十分に厚い(10Å以上)時には、膜の中心部の電界を用いて局所的な誘電率を求めると、それは膜厚に依存せずバルクシリコンの誘電率をよく再現する。表面に近い数原子層

の領域では、表面誘起電子層の影響を受けてバルクの値からのずれが見られる。面方位依存性に関しては、バルク的な様相を示す膜深部でも、電荷密度分布など面方位によって変化するが、影響を受けて表面近くの過渡領域でも面方位による変化が多少見られる。バンドギャップの計算値も、膜厚の増加に伴いバルクの値への収束が見られる。薄膜ではバルクの値に比べて増大した値が得られるが、そのバルクの値からのずれは、局所誘電率が同じ膜厚で示すバルクからのずれに比べてはるかに大きいことが示された。

Al/Si (111) の界面の示す静電応答を調べた。外部電場の印加方向を逆転すると、界面近くのシリコン層で電子分極が大きく変化する (111) 面を構成するバイレアで見て 6 バイレアにわたって変化し、しかもピークは 3 ~ 4 バイレアだけシリコン層に入った位置に見られる。Al-Si 界面に形成される MIGS 層がこの辺りに分布し、電場の逆転が電荷の移動をもたらした結果と見られる。LDOS から推定した MIGS の沁み込みは、その評価値である減衰長にして約 3.1 Å で、過去の文献値と同程度である。局所的な内部電場で見ても、シリコンバルク部の値から界面近傍では大きくずれるが、約 16 Å 程度で収束するのが見られる。電子密度分布も、シリコン内部に向かって急速に収束する傾向を示すが、バイレア内の値は比較的大きなずれを示している。

Al 原子層の薄膜化の Al/Si 界面への影響を調べた。減衰長を用いて評価した場合、MIGS のしみこみの減衰長は、Al 原子層の薄膜かに対して 2 ~ 2.9 Å 程度の変化を示す。一方、ダグリングボンドが剥き出しのベアなシリコン界面では減衰長が 3.9 Å と大きい。界面 MIGS 電子密度による評価でも、シリコンのダグリングボンドによる基板へのしみこみの大きいことが示される。

二原子層以上の Al 層を持つ Al/Si (100) では、フェルミレベルと価電子帯の頂上との間隔を評価して、Si のバンドギャップ中央からやや価電子帯の頂上よりの位置に、フェルミレベル EF がピンギングされている傾向があることが示された。

局所的内部電場の変化領域は大きく二つの部分に分かれる。一つは、Al/Si 界面から 10 数 a.u. の界面極近傍領域での小さな局所内部電場を示す領域であり、ここには非常に大きな MIGS 電子の沁み込みが存在している。もうひとつは、界面から 30 - 40a.u. 入り込んだシリコン基板薄膜深部領域であり、局所的内部電場は基板深部での収束に向かった緩やかな変化を示している。MIGS 電子のしみこみは界面に比べれば小さいが、基板の電子分極に寄与できる大きさを持ち続けている。これらの様子は、基板面方位により変化する様子が見られる。

審 査 の 結 果 の 要 旨

この論文は、第一原理計算を用いてシリコンやアルミの薄膜、Al/Si 界面の静電応答を解析している。この系は、集積回路技術からも重要な系であり、その原子レベルの特性の解析は応用技術上も重要な成果といえる。膨大なデータを集積・駆使して得られた、静電応答から見た界面領域のあり方や、その特性の面方位依存性、また MIGS のしみこみの解析などは高く評価できるものである。

よって、著者は博士 (工学) の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。