

新しい絶縁膜としての高誘電体材料に関する理論的研究

(京大院工) °福島啓悟, 瀬波大土, 立花明知*

*akitomo@scl.kyoto-u.ac.jp

【背景】

LSI の微細化, 高性能化が進むなかで, 電界効果コンデンサ (MOSFET) のゲート絶縁膜に関しては高誘電率 (high- κ) 材料の研究が盛んに行われている[1]. high- κ 材料においてはハフニウム酸化物 (HfO_2) が有力な次世代材料として注目を集めているが, そのしきい値電圧の不安定さが問題になっている[2]. 最近の研究によって, poly-Si/ HfO_2 ゲート構造に関して, しきい値電圧がシフトする原因が膜中の酸素欠陥にあることが明らかになってきた[3,4]. Shiraishi らは, p+poly-Si/ HfO_2 ゲート構造について, 界面付近の酸素欠陥によって実効的なゲート仕事関数が減少するメカニズムを解明している[4]. すなわち, HfO_2 ゲート絶縁膜の性能向上のためには膜中の酸素欠陥の数を減らすことが重要だと考えられる. これを解決するためのひとつの方法として, ゲート絶縁膜として HfO_2 にランタン原子 (La) を混ぜた HfLaO 膜を用いることが期待されている. Wang らによって, HfLaO 膜を使うことで実効的ゲート仕事関数が増加することが明らかにされており[5], これはすなわち, La の添加によって HfO_2 膜中の酸素欠陥が減少することを示唆している. 本研究では La_2O_3 及び HfO_2 のクラスターモデルを用いて, その電子状態を考察する.

【計算方法】

La_2O_3 , HfO_2 はそれぞれ六方晶および斜方晶を基にしたモデルを用いる (Fig.1). La_2O_3 , HfO_2 ともに, 1 つの酸素原子を中心とし, それぞれ 43 原子, 58 原子を含んでいる. 計算には HF 法と DFT を用いる. また, モデルの周辺に点電荷を配置し結晶中の電子状態を再現する.

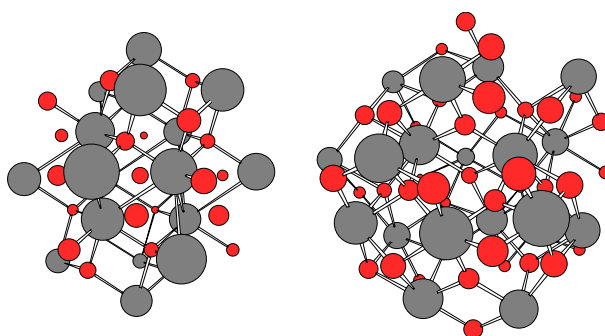


Fig.1 La_2O_3 (左) 及び HfO_2 (右) のクラスターモデル. 灰色の円が La 及び Hf, 赤色の円が酸素を表している.

【結果と考察】

Fig.2 に今回用いたクラスターモデルの GPDOS を示す. La_2O_3 ではエネルギーの低い領域では La の p-軌道と O の s-軌道が相互作用し, エネルギーの高い領域では La の d-軌道と O の p-軌道が相互作用しているのがわかる. また, HfO_2 クラスターではエネルギー

一の低い領域ではあまり相互作用していないが、エネルギーが高い領域では Hf の d-軌道と O の p-軌道が相互作用しているのがわかる。当日は結晶構造の電子状態との比較や、エネルギー密度を用いた詳細な解析を行い、La 及び Hf 酸化膜の誘電物性に関する議論を行う。

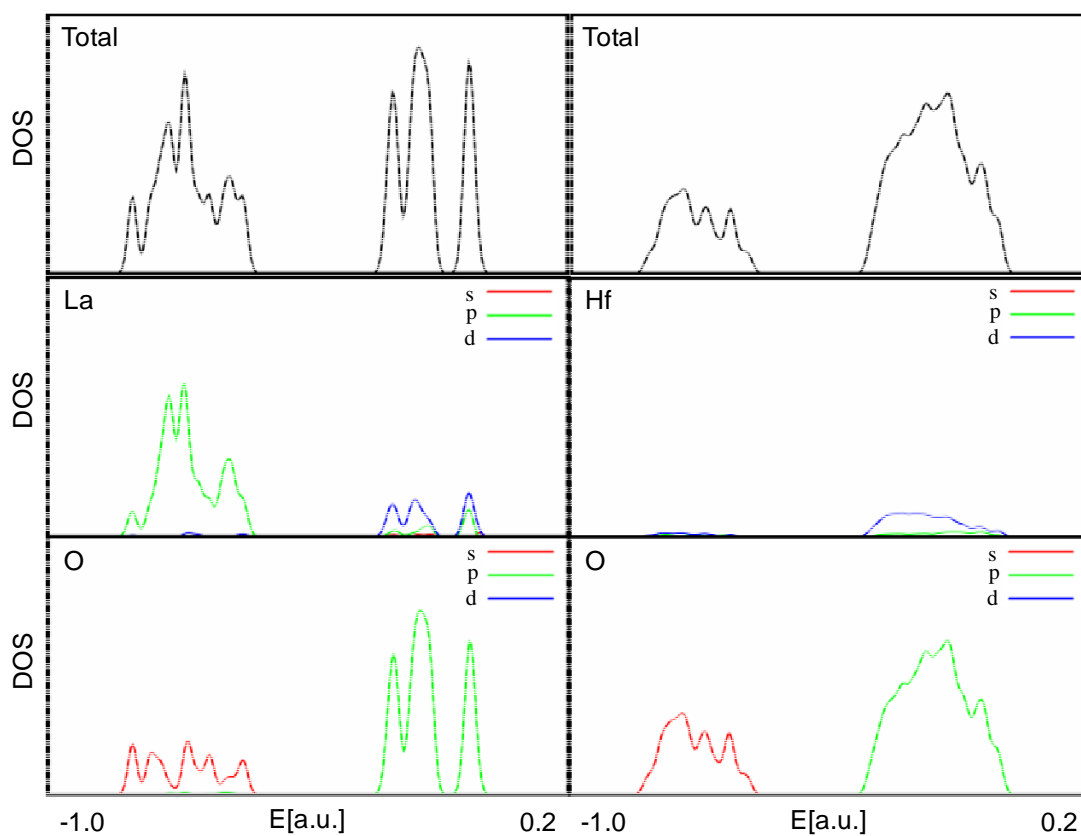


Fig.2 La_2O_3 及び HfO_2 クラスタモデルの GPDOS

【参考文献】

- [1] G. D. Wilk, R. M. Wallace, and J. M. Anthony, *J. Appl. Phys.* **89**, 5243 (2001).
- [2] S. Zafar, A. Callegari, E. Gusev, and M. V. Fischetti, *J. Appl. Phys.* **93**, 9298 (2003).
- [3] C. Hobbs *et al.*, *IEEE Transactions on Electron Devices* **51**, 978 (2004).
- [4] K. Shiraishi, K. Yamada, K. Torii, Y. Akasaka, K. Nakajima, M. Konno, T. Chikyow, H. Kitajima, and T. Arikado, *Jan. J. Appl. Phys.* **43**, L1413 (2004).
- [5] X. P. Wang, M. F. Li, A. Chin, C. X. Zhu, J. Shao, W. Lu, X. C. Shen, X. F. Yu, R. Chi, C. Shen, A. C. H. Huan, J. S. Pan, A. Y. Du, P. Lo, D. S. H. Chan, and D. L. Kwong, *Solid State Electronics* **50**, 986 (2006).