

審査の結果の要旨

氏名 費嘉陽

MOSFET はシリコン (Si) CMOS を始めとする多くの電子デバイスで重要な役割を担っているが、高誘電率ゲート絶縁膜 (High-k 膜) の導入以降、その閾値電圧の設計のためには、積層されたゲート絶縁膜の界面で生じるダイポール効果の制御が不可欠となっている。この効果は異なる誘電体間に必然的に生じる電荷対によって生じると考えられるが、その電荷対の起源については十分に解明されていない。このような背景のもと、本論文は様々な誘電体のつくる界面について電荷対の起源を分類し、それらの電荷対を生じる機構について一般の誘電体同士の界面にも広く適用可能なモデルを提案するものである。

本学位論文は 6 章から構成されている。

第 1 章は序論であり、本研究の背景となる High-k 絶縁膜技術の概論とともに、High-k/SiO₂ 界面で生じるダイポール層に関するこれまでの知見をまとめたものであり、界面ダイポール層の概念や、その起源を説明するための既存のモデルが説明されている。

第 2 章は研究手法の説明であり、本研究で用いる主な実験手法および分子動力学法の計算手法についてまとめている。

第 3 章では、High-k/SiO₂ の界面のうち、観察されるダイポール効果の向きや大きさが既存のモデルでは説明できない系である MgO/SiO₂ を取り上げ、ダイポール効果のアニールによる変化の実験的な把握と共に、そのような変化を説明する電荷対の起源を議論している。アニールと共に界面反応層の量や組成が変化する実験事実に着目し、界面反応層の形成に伴う陽・陰イオンの移動量の必然的な偏りが電荷対の起源とするモデルを提示している。

第 4 章では、界面ダイポール効果の発現が、従来から報告されてきた High-k と SiO₂ の界面に限定されず、あらゆる酸化物同士の界面に対して一般化できることを検証している。ここでは界面に電荷対を生じる起源として、第 3 章で提案した界面反応層の形成に伴う電荷の偏りと、従来モデルで提唱されてきた界面構造緩和に伴う酸化物イオンの配置の変化によるものの 2 種類を想定した。MgO/Al₂O₃ 界面を用いた実験から、SiO₂ 系を含まない誘電体界面で初めてダ

ダイポール効果の明確な観測に成功、さらにこの系の分子動力学計算を行い、界面反応に伴う Mg イオンと O イオンの移動量の不均衡によって電荷対が必然的に生じることを明らかにした。従ってこれは前述の 2 つの電荷対の起源のうちの前者が支配的にはたらく系であると結論している。

第 5 章では、対象とする系を酸化物同士の界面ではなく、酸化物とフッ化物の両者がつくる界面に広げ、電荷対を生じる駆動力が、酸化物のみで構成された界面以外にも、誘電体同士の界面に対して一般化したモデルで表現できることを示している。Al₂O₃ と AlF₃ の積層順を入れ替えて界面を形成する実験を通じ、ダイポール効果の発現が、誘電体の界面における普遍的な現象であることの実験的な証拠を世界で初めて得ている。さらに、2 つの異なる種類の陰イオンが混在して界面を形成する本系では、電荷対を形成するための 2 つの異なる駆動力が同時にはたらくと考える新たなモデルを提案している。1 つ目の駆動力は、この界面では界面構造の緩和のために O イオンと F イオンが配置を変えるが、その移動量の違いが電荷対を生むものである。分子動力学計算からは、O イオンと F イオンの移動量に偏りがあり、実験的に得られた電荷対の向きと整合することが示された。これは酸化物界面において O イオンの配置の変化が鍵と考える従来モデルを一般化したものに相当する。しかしこれに加え、両イオンが異なる電荷量を持つ陰イオンであることから、その混合が電荷対を必然的に発生させることの考慮が必要となる。両者の駆動力の定量的な関係は未解明であるものの、後者の駆動力の考慮なしには、組成の差が比較的小さい Al₂O₃ と AlO_xF_y (酸フッ化物) の界面で大きなダイポール効果が観察される実験的事実を説明できないことを指摘している。

第 6 章は、総括および将来展望を述べている。第 3 章から第 5 章で得られた結果を踏まえ、異なる誘電体の界面で発現するダイポール効果について、その電荷対の起源となるものを分類・整理した上で、それらの電荷対の起源を誘電体界面全般に対して一般化したモデルを提案している。

以上のように本論文は、2 つの異なる誘電体の界面に生じるダイポール効果の起源についての普遍的な理解のため、様々な異なる誘電体の組み合わせからなる界面で発現するダイポール効果を実験的に検証すると共に、界面形成に伴う種々の電荷対生成機構に関するモデルを提案したものであり、電子デバイス応用の観点のみならず、マテリアル工学の観点からも意義は大きい。

よって本論文は博士 (工学) の学位請求論文として合格と認められる。