

分子動力学シミュレーションによる アモルファスSiNx膜の構造解析

シミュレーションによってアモルファス膜のミクロな構造解析が可能です

測定法 : 計算科学・データ解析

製品分野 : LSI・メモリ

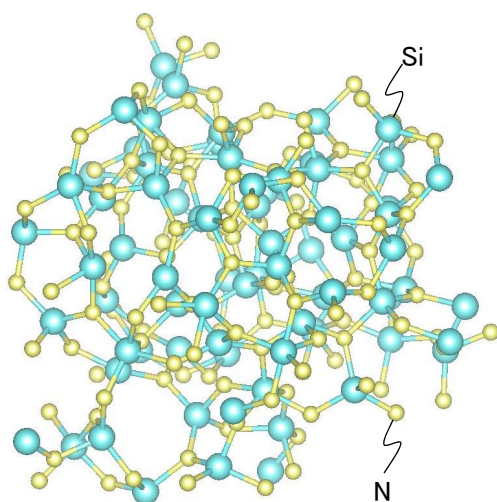
分析目的 : 構造評価

概要

アモルファスSiNx(a-SiNx)膜は、N/Si比などの組成変化によって半導体から絶縁体まで物性が大きく変化することから、トランジスタ用ゲート絶縁膜など幅広い用途で用いられています。一方、結晶性のないアモルファス構造の材料に対し、原子レベルのミクロな構造解析を行える実験手法は限られているため、シミュレーションによってさまざまな組成、密度を有したアモルファス構造を作成し、解析を行うことは有効なツールとなります。本資料では、分子動力学計算を用いたa-SiNx膜の構造解析事例を紹介します。

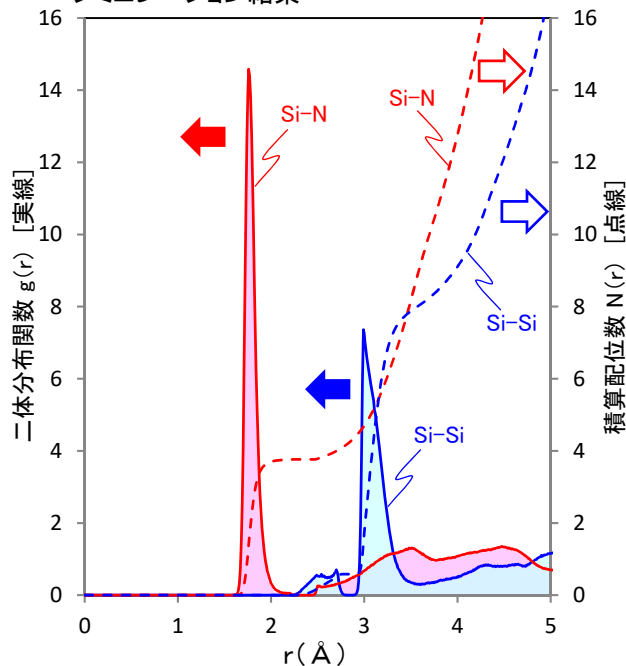
データ

■ a-SiNx膜(Si₃N₄ 密度2.80g/cm³)の
原子配置シミュレーション結果
※一部領域を切り取って表示



※VESTA(<https://jp-minerals.org/vesta/jp/>)を利用

■ 動径分布関数 $g(r)$ ・積算配位数 $N(r)$ の
シミュレーション結果



配位	原子間距離 (Å)		配位数		$\angle \text{Si-N-Si}$	
Si-N (第一近接)	計算	測定 ^[1]	計算	測定 ^[1]		
	1.76	1.77	3.8	4.1		
Si-Si (第二近接)	計算	測定 ^[1]	計算	測定 ^[1]	計算	測定 ^[1]
	2.99	2.98	7.5	7.5	116.3°	114.7°

[1] N. Umesaki *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **32** (1993) Suppl. 32-2 649.



✓ ご指定の組成・密度に合わせたアモルファス構造の作成が可能です

分析サービスで、あなたの研究開発を強力サポート！

一般財団法人
MIST 材料科学技術振興財団

TEL : 03-3749-2525 E-mail : info@mst.or.jp

URL : <https://www.mst.or.jp/>