

СТАБИЛЬНОСТЬ ТОНКИХ ПЛЁНОК ДИОКСИДА ГАФНИЯ

Карженевская В.Ю., Алексеев А.Ю.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
г. Минск, Республика Беларусь

Мигас Д.Б. – доктор физ.-мат. наук

В ходе работы исследовались тонкие плёнки диоксида гафния (HfO_2) с толщиной до 30 Å, имеющие различные фазы и кристаллографические ориентации. Расчёты производились с целью выявления наиболее стабильной из фаз. Определили, что при толщинах плёнки менее 20 Å наименьшей полной энергией обладают плёнки с кубической структурой, а при больших толщинах – с моноклинной структурой. 2D HfO_2 с кубической структурой также являются динамически стабильными.

Использование в качестве подзатворного high-k диэлектрика диоксида гафния (HfO_2) дало толчок к развитию производства масштабируемых МОП-структур [1]. Известно, что существует несколько объёмных фаз HfO_2 . На наиболее стабильной является моноклинная фаза. При формировании тонких плёнок HfO_2 стабильность таких структур будет зависеть от поверхностной энергии и энергии на границе раздела оксид/подложка, что может привести к стабилизации метастабильной в объёме фазе в виде тонких плёнок. Также возможно оценить критическую толщину таких плёнок и их электронные свойства.

Исследование тонких плёнок HfO_2 производилось путём теоретического моделирования методами из первых принципов в пакете Quantum ESPRESSO. Для расчёта обменно-корреляционного потенциала использовалось обобщённое градиентное приближение. Для моделирования фононных спектров применялась теория возмущений функционала плотности.

Расчёт полных энергий тонких плёнок HfO_2 с различной ориентацией производился с учетом кубической, моноклинной, орторомбической и тетрагональной фаз (рисунок 1).

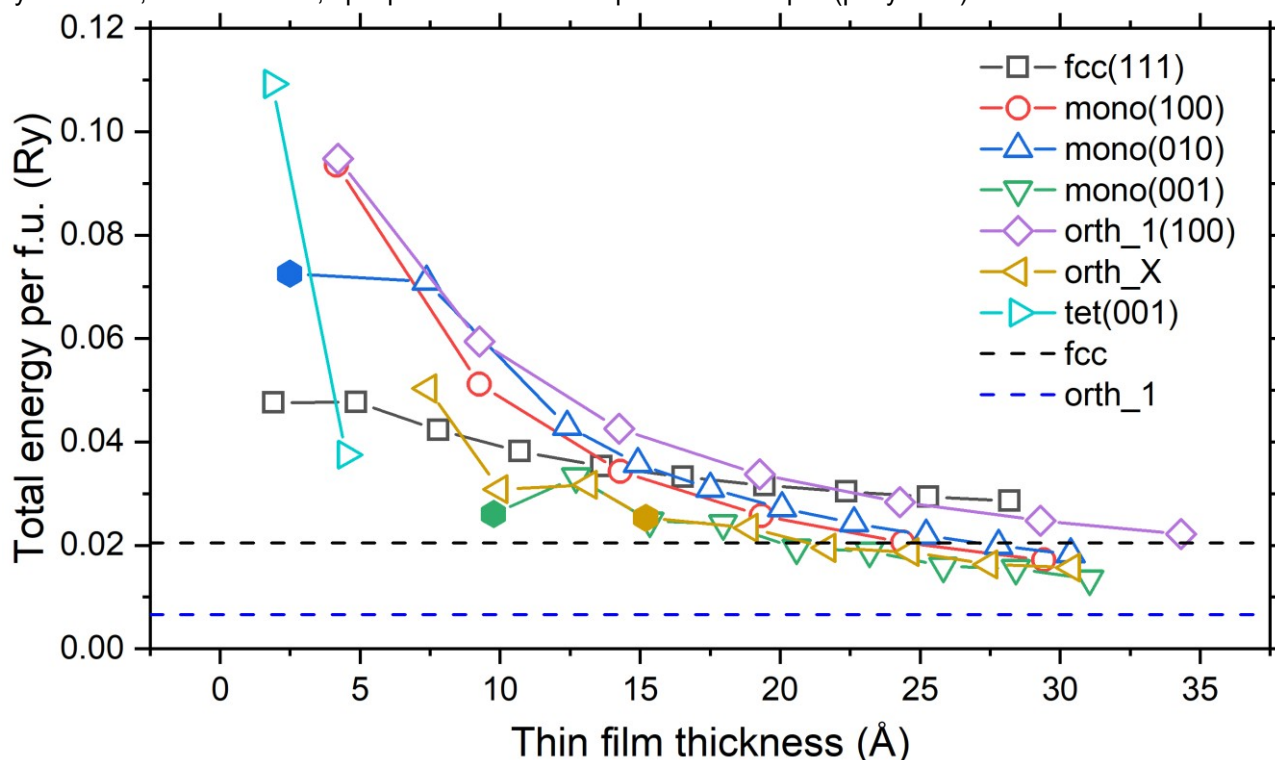


Рисунок 1 – Зависимость полной энергии от толщины плёнки для различных фаз HfO_2

Кубическая гранецентрированная фаза HfO_2 (fcc) является одной из наименее стабильных объёмных фаз и оказалась динамически нестабильной при стандартных давлениях и нулевой температуре [2]. Однако при формировании 2D HfO_2 структуры с ориентацией (111) и толщиной в один монослой установлено, что она динамически стабильна, так как отсутствуют мнимые частоты в фононном спектре (рисунок 2), и обладает наименьшей полной энергией по сравнению с другими 2D структурами. Более того, обнаружено, что тонкая плёнка $\text{HfO}_2(111)$ с кубической структурой и толщиной в два монослоя также динамически стабильна (рисунок 2).

По данным некоторых источников [3] в случае моноклинной фазы (mono) поверхности (100), (10) и (001) не обладают самой низкой поверхностной энергией и нужно рассматривать другие высокоиндексные поверхности, а также плёнки с нарушением HfO_2 стехиометрии. В результате расчетов установлено, что данные плёнки при толщинах менее 20 Å уступают по полной энергии

пленкам других фаз. Они оказались более стабильны при бóльших толщинах (более 20 Å). Также выявлено, что 2D HfO₂(010) структуры толщиной в один слой и HfO₂(001) толщиной в четыре слоя после оптимизации претерпели значительные структурные изменения, не позволяющие считать полученные фазы моноклинными (на рисунке 1 результаты этих расчётов обозначены сплошным гексагоном).

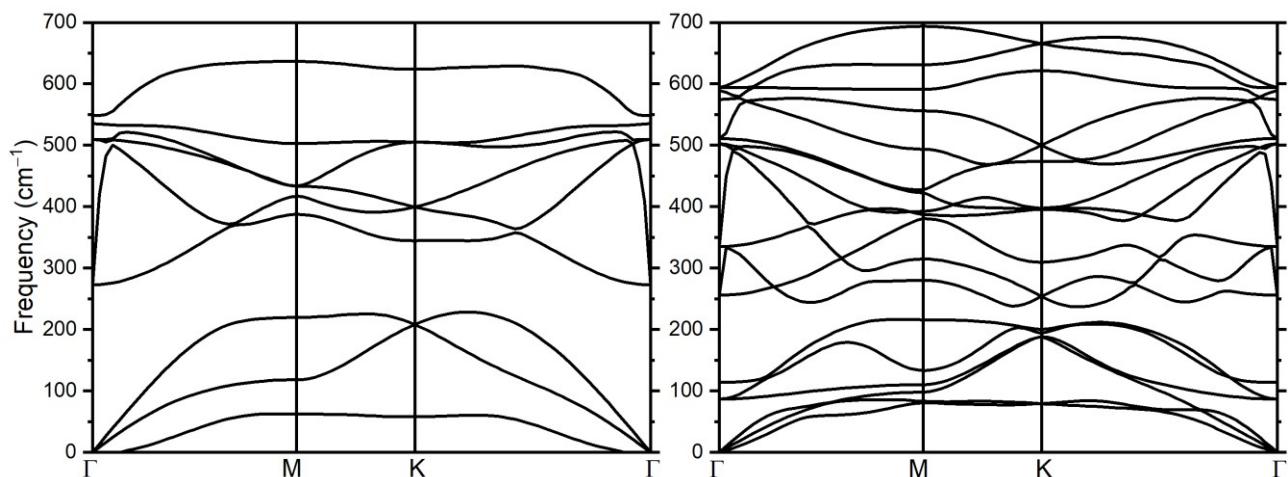


Рисунок 2 – Фононный спектр для однослойного (слева) и двухслойного (справа) 2D HfO₂(111)

Также исследовались плёнки HfO₂(100) орторомбической фазы и толщиной 23 Å. Установлено, что после структурной оптимизации таких плёнок происходит их трансформация в моноклинную фазу с ориентацией (100). Плёнки HfO₂(001) орторомбической фазы толщиной в один или два слоя после оптимизации трансформировались в тетрагональную фазу с поверхностью (001). При увеличении толщины таких пленок наблюдаются некоторые преобразования, результаты которых нельзя соотнести ни с одной из существующих фаз, на рисунке 1 данная фаза обозначена как orth_X. На данный момент неизвестно является ли данная объёмная фаза динамически стабильной.

Дальнейшие исследования предполагают изучение динамической стабильности тонких пленок с различными фазами и ориентациями с целью выявления тех из них, которые являются динамически стабильными с последующим расчетом их энергетического спектра. Это позволит провести сравнение результатов, полученных для fcc 2D HfO₂ структур и тонких пленок topo HfO₂.

Список использованных источников:

1. Carrier transport in HfO₂/sub 2/metal gate MOSFETs: physical insight into critical parameters / M. Cassé [et al.] // IEEE Transaction on Electron Devices, 2006. – Vol. 53. – P. 759-768.
2. Pathways towards ferroelectricity in hafnia / T. D. Huan [et al.] // Physical review B, 2014. – Vol. 90. – P. 064111.
3. Mukhopadhyay A. First-principles calculations of structural and electronic properties of monoclinic hafnia surfaces / A. Mukhopadhyay, J. F. Sanz, C. B. Musgrave // Physical review B, 2006. – Vol. 73. – P. 115330.