

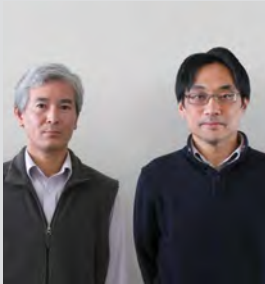
アモルファス金属酸化物の構造にある普遍性

絶縁膜や透明電極などの合理的設計への貢献に期待



西尾 憲吾

にしお けんご
k-nishio@aist.go.jp
ナノシステム研究部門
非平衡材料シミュレーショングループ
主任研究員
(つくばセンター)



中村 恒夫

なかむら ひさお (右)
hs-nakamura@aist.go.jp
所属は同上
主任研究員
(つくばセンター)

宮崎 剛英

みやざき たけひで (左)
takehide.miyazaki@aist.go.jp
所属は同上
研究グループ長
(つくばセンター)

材料は原子から構成されているため、原子レベルで材料の性質を理解して制御することが材料科学と工学の究極的な目標です。計算機シミュレーションによって材料の構造や電気伝導特性などを原子レベルで高精度に予測することにより、新しい材料やデバイスの開発を支援したいと考えています。

関連情報：

- 参考文献

K. Nishio *et al.*: *Phys. Rev. Lett.*, 111, 15502 (2013).

- プレス発表

2013年9月30日「アモルファス金属酸化物の構造に単純な秩序があることを提案」

アモルファス金属酸化物の原子構造

金属酸化物はトランジスタやメモリーなどの絶縁膜や太陽電池の透明電極などとして使われる重要な材料です。膜の均一性や製膜プロセスの容易性を担保するために、よくアモルファス構造が採用されます。アモルファス金属酸化物の原子構造に対する十分な知見があれば、材料の均一性と電氣的絶縁性を両立させるプロセス条件などを合理的に設計することが可能になると期待されます。しかし、結晶金属酸化物と異なり原子構造が大変複雑であるため、これまでアモルファス金属酸化物の原子構造に対する包括的な理解がなされていませんでした。

金属と酸素がランダム充填構造を形成

そこで今回、7種類の金属酸化物 (TiO_2 、 ZrO_2 、 HfO_2 、 Cu_2O 、 Al_2O_3 、 Ga_2O_3 、 In_2O_3) に対してアモルファス構造の第一原理計算を行いました。図1に、7つの金属酸化物のうち Al_2O_3 で見つかった金属原子、および酸素原子の20面体配列を示します。球をランダム充填すると図2に示したような五角両錐形構造が多く含まれることが知られており、五角両錐形構造から作られている20面体構造を含むことから、アモルファス金属酸化物の構造は、金属と酸素がそれぞれ球のランダム充填構造を形成して両者が組み合

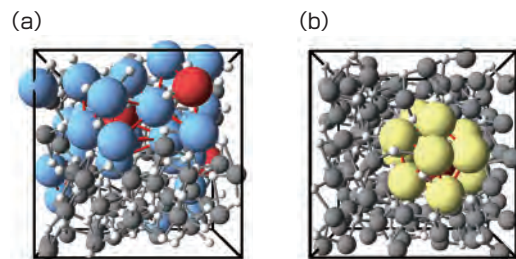


図1 第一原理計算で得られたアモルファス Al_2O_3 の20面体配列

色づけされた大きな球は (a) アルミニウム原子および (b) 酸素原子の20面体配列を示す。

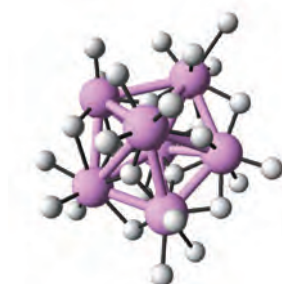


図2 五角両錐形構造 (色づけされた大きな球)

わさってできていることが強く示唆されます。

五角両錐形構造がアモルファス金属酸化物に含まれることを定量的に調べるため、最近接する金属原子間および酸素原子間の二等分面で囲まれる多面体(これをポロノイ多面体という)を計算機上で構築し、ポロノイ多面体を構成する面に含まれる辺の数を数え、面の形の分布を調べました(図3 (a) ~ (g))。さらに、球のランダム充填構造の例としてレナード-ジョーンズポテンシャルで相互作用する粒子系のアモルファス構造に対しても同様の解析を行いました(図3 (i))。図3 (a) ~ (g)から明らかのように、金属の種類や酸素含有量に関係なく、金属と酸素ともに、ポロノイ多面体を構成する面の形は五角形が最も多く、図3 (i)に示したレナード-ジョーンズポテンシャル系と同じ結果になっています。

このことから、アモルファス金属酸化物の構造は、金属と酸素がそれぞれ球のランダム充填構造を形成していることがわかりました。

今後の予定

今回明らかになった中距離秩序の知見を利用して、さまざまなアモルファス金属酸化物材料の原子構造を合理的にモデリングできる手法の開発につなげていく予定です。

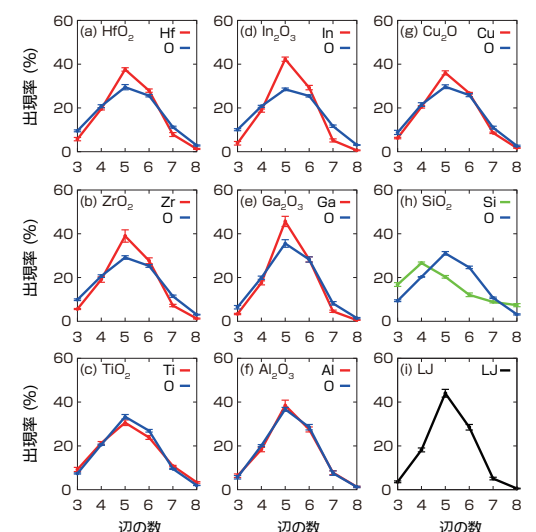


図3 (a) ~ (g) アモルファス金属酸化物、(h) 半導体Siの酸化物(SiO_2) および (i) レナード-ジョーンズポテンシャルで相互作用するアモルファス構造における金属と酸素それぞれのポロノイ多面体の辺数分布