

# 金属 Germanide の相図と Ge 界面におけるショットキーバリア

## Phase Diagram of Metal Germanide and Schottky Barrier Height at Germanide/Ge Interfaces



千葉大理<sup>1</sup> <sup>○(DC)</sup>飯塚 将太<sup>1</sup>, 中山 隆史<sup>1</sup>

Faculty of Science, Chiba Univ.<sup>1</sup> <sup>○(DC)</sup>Shota Iizuka<sup>1</sup>, Takashi Nakayama<sup>1</sup>

E-mail: iizuka@chiba-u.jp

Si に代わる高速デバイス材料の 1 つとして の供給量が増加すれば Ge 組成の大きい NiGe<sub>2</sub> Ge が再び注目されている。金属/Ge 界面ではシ相が安定となるが、Ni シリサイドと異なり Ni ・ ヨットキー(SBH)が多くの金属に対してピニン Ge 両者の供給量が多いと Ni<sub>5</sub>Ge<sub>3</sub>相が安定にな グして制御しにくいことが知られている。一方、 る。この結果は実験事実と定性的に符合する。 整合の良い金属 Germanide (MGe<sub>2</sub>)に対しては、 次に超格子構造を用いて、 NiGe<sub>2</sub>/Ge および 金属原子 M の dangling bond が原因で M を変え Ni<sub>3</sub>Ge/Ge 界面の安定な界面構造と各界面におけ る SBH を調べた。NiGe<sub>2</sub>は Geβ(111)面上で安定 しかし、金属 Germanide (M<sub>x</sub>Ge<sub>y</sub>)はどの組成比相 な界面を形成するが、原子の供給状況に依り複 数が安定か、界面方位や SBH の組成比依存性はど 数の安定構造が存在する。これらの界面に対し つか等、我々の知見は十分ではない。そこで本研 て計算した正孔の SBH を図 2 に示す。SBH の値 究では、いくつかの組成比の金属 Germanide は界面構造に依存して 0~0.3eV の範囲で変化す Ni<sub>x</sub>Ge<sub>y</sub>を対象に、第一原理計算により金属 る。一方、Ni<sub>3</sub>Ge の場合は Ge(100)界面での結果で Germanide/Ge 界面における安定な界面構造や あるが、約 0.2eV となった。これらの結果は、 SBH の組成比依存性を検討した。 Ni<sub>x</sub>Ge<sub>y</sub> Germanide においては、SBH は組成比や界

面構造に依存して有意に変化することを示して いる。発表では、他の組成の場合、金属原子種を Pt に変えた場合の結果も示し、界面の安定性及 量が増加すれば Ni 組成の大きい Ni<sub>3</sub>Ge 相が、 Ge び SBH 変調の原因について議論する。

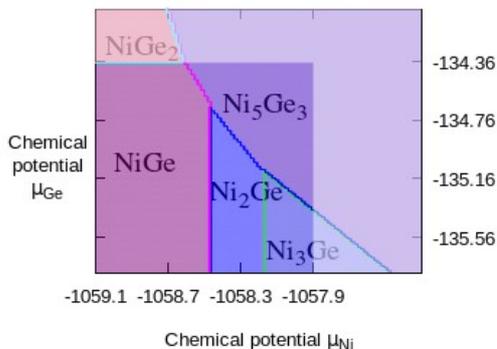


図 1. バルク Ni<sub>x</sub>Ge<sub>y</sub>の安定組成相の化学ポテンシャル依存性。左下の四角が、バルクとして安定な領域。

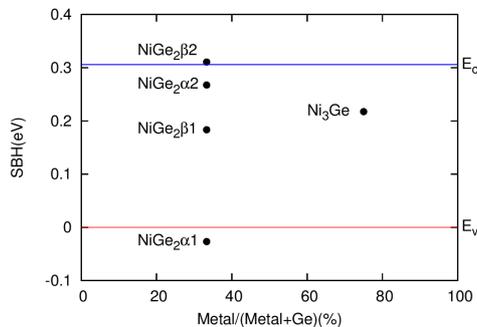


図 2. NiGe<sub>2</sub>/Ge(111)、および Ni<sub>3</sub>Ge/Ge(100)界面におけるショットキーバリアの界面構造依存性。E<sub>v</sub>はGeの価電子帯上端位置。