

WSi_n/Ge 接合の結合状態とフェルミレベルピニング解除 Bonding states and Fermi-level depinning of WSi_n/Ge junctions

産総研ナノエレ¹, JST-さきがけ², 産総研ナノシステム³, 産総研⁴°内田 紀行¹, 岡田 直也^{1,2}, 宮崎 剛英³, 福田 浩一¹, 金山 敏彦⁴NERI-AIST.¹ JST-PREST.² NRI-AIST³, AIST⁴, °N. Uchida¹, N. Okada^{1,2}, T. Miyazaki³,K. Fukuda¹, T. Kanayama⁴

E-mail: nori-uchida@aist.go.jp

【はじめに】Ge は、Si よりもキャリア移動度が高く、ポスト Si 材料として注目されている。しかし、金属電極と接合を形成すると、価電子帯エッジ付近に強くフェルミレベルピニング (FLP) を起こしてしまうため、仕事関数の小さな金属電極を用いても、n 型 Ge (n-Ge) に対しては障壁高さが 0.5-0.6 eV とほとんど変化せず、コンタクト抵抗を低減することができない[1]。また、p 型の Ge (p-Ge) に対して、金属電極はオーミックコンタクトを形成し、整流特性を得ることができない[1]。そのため、ピニングの解除が金属/Ge 接合特性向上の鍵となる。我々は、金属電極と Ge(111)基板の間に、狭ギャップ半導体の W 内包 Si クラスタ (WSi_n: n=8-14) 膜 (膜厚 3-5 nm) を挿入することで、FLP を解除し、n-Ge に対して金属電極 (W, Ti) の仕事関数に対応した障壁高さ (0.29-0.46 eV) を持つ接合、p-Ge に対しては 0.16 eV の障壁高さを持つ接合が形成できることを示した[2]。本研究では、WSi_n 膜による FLP 解除機構を詳しく調べるために、WSi_n/Ge 接合界面の結合状態、ポテンシャルの変化を X 線光電子分光 (XPS) で評価した。また、結合状態を解析するために、第一原理計算によるシミュレーションを行った。

【結果】WSi_n/Ge 接合形成に関しては、文献[2]と同じ手法を用いた。WSi_n/Ge 試料を超高真空中を搬送し、大気にさらすことなく XPS 測定を行った。X 線源として MgKα 線を用いた。図 1 に WSi_n/p-Ge 接合と清浄な p-Ge から得られた Ge 3d^{5/2} のスペクトルを示す。WSi_n/p-Ge 試料からは、W4f のシグナルも検出されている。WSi_n 膜を形成することで、Ge 3d^{5/2} の信号が、0.2 eV 高結合エネルギー (BE) 側へシフトすることが分かる。これは、Ge 基板表面のフェルミ準位の変化を反映しており、WSi_n 膜の形成により FLP が解除されたことを示している。n-Ge の場合、Ge 3d^{5/2} の信号は、WSi_n 膜の形成により、0.1 eV 高 BE 側へシフトしており、やはり FLP 解除を示している。これらの結合エネルギーのシフト量は、電気的な測定から得られる障壁高さ [2] と整合している。WSi_n/p-Ge の試料において、Si2p の信号を解析すると、電気的に中性な成分 (99.8 eV) と正に帯電し高 BE 側へシフト (100.5 eV) した成分があることが分かった。WSi_n/Ge(111) 界面構造の第一原理計算の結果、価電子の分布に偏りがあり、WSi_n 膜中の Ge と結合している Si の価電子が平均 3.90 個、Ge と結合していない Si で W と結合しているものが平均 3.99 個であった。前者が正に帯電した成分で、後者が中性成分と考えられる。つまり、WSi_n 膜の Si でケミカルシフトした成分は、Ge 界面状態を終端し正に帯電したものと判明した。

【まとめ】以上の様に、WSi_n/Ge 接合の FLP 解除を XPS で観測し、電気的な接合評価と整合する結果を得た。FLP 解除機構を調べる上で重要な界面状態密度や界面終端の安定性を議論するために、XPS による WSi_n 膜の Si の結合状態と第一原理計算による電荷分布を比較し、ケミカルシフトの起源を明らかにした。

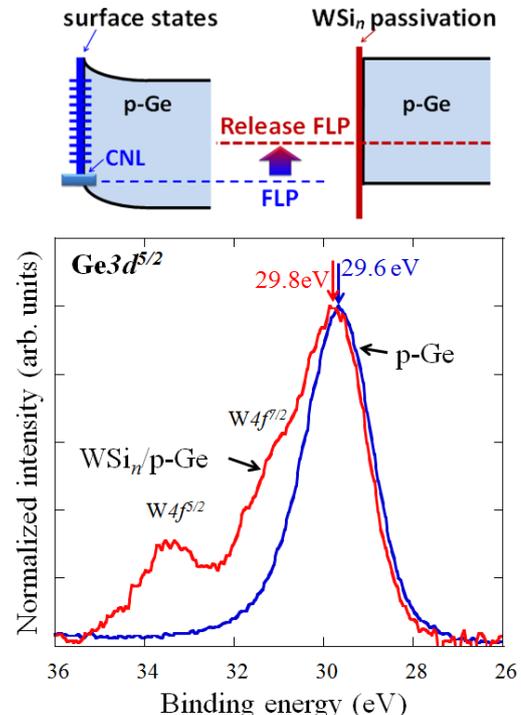


図 1: FLP 解除のバンド図と WSi_n/p-Ge と p-Ge 清浄表面に対する Ge3d^{5/2} の XPS。

参考文献: [1] T. Nishimura, K. Kita, and A. Toriumi, Appl. Phys. Lett. **91**, 123123 (2007). , [2] N. Okada, N. Uchida, and T. Kanayama, Appl. Phys. Lett. **104**, 062105 (2014).