

## 金属/Ge 界面近傍における点欠陥の密度増加の起源 Origin of increase of point defect density around metal/Ge interfaces

千葉大理 佐々木 奨悟, 中山 隆史

Chiba Univ., Shogo Sasaki, Takashi Nakayama

E-mail: [s4663275@gmail.com](mailto:s4663275@gmail.com)

Ge は凝集エネルギーが小さいため、Si より点欠陥の多い半導体として知られている。特に金属界面近傍の欠陥は界面の電子物性を支配する鍵となるが、その密度分布には不明な点が多い。そこで本研究では、第一原理計算を用いて、界面近傍での点欠陥密度について検討した。

図 1 (a) に、Al/Ge(100) 界面近傍での Ge 空孔欠陥の形成エネルギーを、界面からの距離の関数として示す。界面から 10 Å 程度離れた領域では、形成エネルギーは約 2.0 eV のバルク値に収束する [1]。一方、10 Å 以下の領域では、形成エネルギーはバルク中より小さく、徐々に変化している。この形成エネルギーを使って求めた空孔欠陥密度を界面からの距離の関数として図 2 (b) に示す。界面近傍では、空孔欠陥密度はバルク中よりも 1~6 桁ほど高くなることわかる。

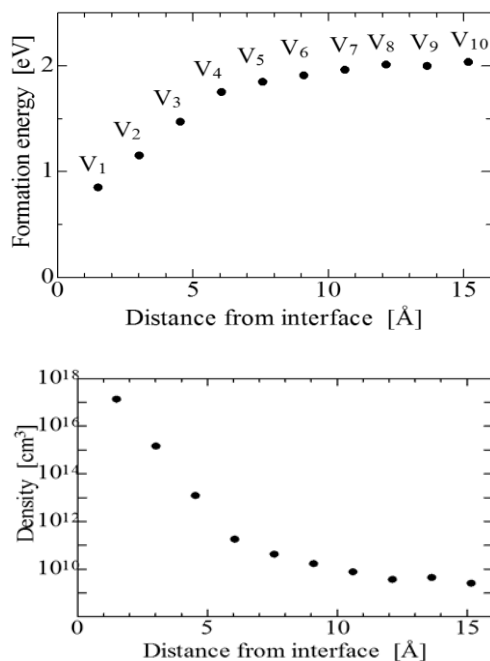


図 1. Al/Ge(100) 界面における Ge 空孔欠陥の、(a) 形成エネルギー、及び (b) 欠陥密度の界面からの距離依存性。

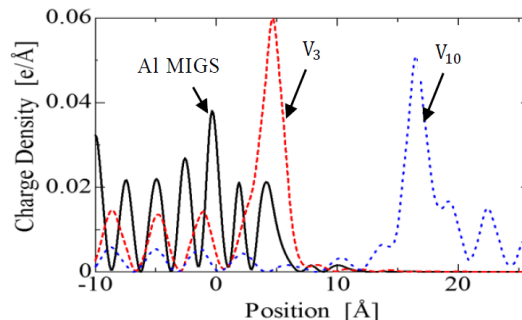


図 2. Al/Ge 界面(100)における空孔欠陥状態の電荷分布。空孔が 4 層目(赤)、及び 11 層目(青)にある場合、黒は清浄界面での MIGS の電荷密度。横軸は界面からの距離で、 $z=0$  が界面の位置、 $z>0$  が Ge 層。

界面近傍で形成エネルギーが小さくなる理由は、金属誘起ギャップ状態(MIGS)と欠陥準位との混成にある [2]。図 2 に、Al/Ge 界面に空孔がある場合の空孔起源の電子状態の波動関数を示す。黒実線は清浄界面での MIGS である。Al の MIGS は Ge 層に 5~6 Å 浸みだしている。4 層目( $V_3$ )に空孔が位置する場合(赤破線)、空孔状態は MIGS と混成しているが、11 層目( $V_{10}$ )に位置する場合、空孔状態は空孔に強く局在し、MIGS との混成は殆ど起きていない。他の点欠陥(格子間欠陥、置換欠陥)についても計算を行い、MIGS と欠陥準位との同様な混成とそれを反映した形成エネルギーの変化が見られた。このように MIGS は Schottky バリアを決めるだけでなく、界面近傍の欠陥密度や原子の挙動を支配する一因となる。

講演では、これら結果の詳細、および形成エネルギーの金属種、面方位、半導体種依存性、点欠陥と Schottky バリアの関係も示し議論する。

[1] J. Vanhellefont, P. Spiwak, K. Sueoka, J. Appl.Phys. 101 (2007) 036103.

[2] 平松智樹、中山隆史、応用物理学会春季学術講演会、19a-D9-8、2014.