20a-A27-9

ダイアモンド半導体の電極形成に関する電子状態計算

Ohmic contacts on diamond semiconductor devices

北陸先端科学技術大学院大学 情報科学 [1] ○ 上田　陽亮 [1]，前園　涼 [1]

School of Information Sci., JAIST[1] ○Tack A. Uyeda[1], Ryo Maezono[1]

E-mail: tueeda@jaist.ac.jp

高い熱伝導率と電子移動度といった優れた物性値を持つダイアモンドは、シリコンでは不可能とされる高温・高電圧下といった過酷な環境でも使用可能なパワーデバイスとしての可能性を秘めている。ダイアモンドの電子デバイス応用に向けて重要な課題として電極形成が挙げられるが、特にダイアモンド半導体はパワー半導体としての応用が期待されるため、電極には良質な電気特性以外にも高い耐剥離性が要求される。

本研究では、ダイアモンド半導体電極を対象に「電気伝導性」及び「耐剥離性」を密度汎関数法によって評価した。耐剥離性の評価には電極金属に関する界面凝集エネルギー値

$$E_{\mathrm{coh}}(x) = \frac{1}{2}\left\{E_{\mathrm{slab}}(x) - \left(E_{\mathrm{parent_surf}} + 2\cdot E_{\mathrm{atom}}(x)\right)\right\}$$

を用いた。電気伝導性に関しては、界面での電気二重層の発現に呼応する、状態密度図に見られるギャップ内孤立ピークの有無をもって評価を行った。電極金属種にはカーバイドメタル (Ti, Ta, V) に加え、従来、実験的によく用いられる非カーバイドメタル (Au, Pd) も候補として評価した。またダイアモンドは表面修飾によって様々な界面特性を作り出せることが知られており、最適な電極金属種の探索以外に、電極として最適な表面終端元素の探索も同時に行った。ダイアモンド・スラブと終端原子を合わせた母体表面系に関しては、実験において一般的な水素終端、酸素終端ダイアモンドを取り上げ、無終端系と比較した際の電極の接着性、電気伝導性を比較した。

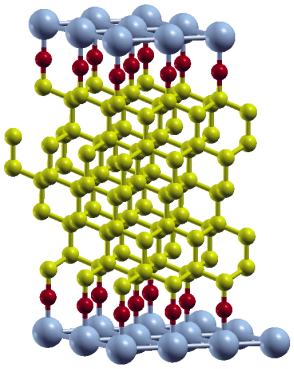


Fig 1: Model of diamond-metal system. Yellow, red and blue balls are carbon, termination elements and metals, respectively.

物質トレンド比較において、計算条件を注意深く検討した結果、先行研究とは異なり、酸素終端ダイアモンドとタンタル電極が最も深い凝集をもつオーム性接合を与える事が明らかになった。

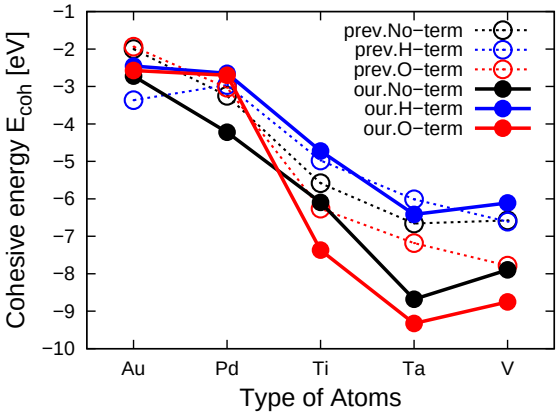


Fig 2: Surface cohesive energies of metal sheets on diamond (111) surface. Dotted lines are taken from a previous study [1]. Our results (solid lines) show that Ta sheet on oxygen terminated diamond gives the most stable cohesion.

[1] I. Motochi, N. Makau and G. Amolo, Diamond Relat. Mater. 23, 10 (2012).

© 2014 年　応用物理学会