

第一原理計算による Sn/Ge 界面の構造と SBH 変調の関係

First Principles Study of the Relation between Schottky-barrier Change and Interface Structure at Sn/Ge Interfaces

千葉大理 ○小日向 恭祐, 中山 隆史

Chiba Univ. °Kyosuke Kobinata, Takashi Nakayama

E-mail: kobinata@phys8.s.chiba-u.jp, nakayama@physics.s.chiba-u.ac.jp

金属/Ge 界面においては、金属のフェルミエネルギー位置(EF)が金属種に依らずに Ge の価電子帯上端近傍にピンングされることが知られている。しかし最近、Ge 表面上に Sn を室温で蒸着させて Sn/Ge 界面を形成すると金属 Sn の EF が価電子帯上端から 0.3eV 程度上昇することが見出された(界面を 150°C 以上でアニールすると EF は価電子帯上端近傍のピンング位置に戻る) [1]。しかし EF 上昇の理由は未だよくわかっていない。ところで、電極金属となっているのは正方晶の β -Sn 相であるが、Si 上に Sn を成長させると成長方法によっては半導体である α -Sn 相が存在することも知られている[2]。そこで本研究では、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を用いて、 β -Sn/Ge 界面に α -Sn 相が存在した場合に、ショットキーバリア高さ(SBH)がどのように変化するかを検討した。計算に用いた Ge の表面は(111) α 面で、超格子膜を用いて SBH の計算を行った。以下、 α -Sn を n 層形成した界面を β -Sn/(α -Sn)_n/Ge と書く。

図に、 β -Sn/(α -Sn)_n/Ge(111)界面における正孔の SBH の値を α -Sn 相の層数の関数として示す。n=0 は α -Sn 相が存在しない場合であり、このときの SBH は約 0.1eV である。 α -Sn 層数が増えていくと SBH が徐々に増加していき、n=4 の場合には SBH は約 0.23eV になる。ところで、 β -Sn/(α -Sn)_n/Ge(111)界面は、 β -Sn/ α -Sn と α -Sn/Ge の 2 つの界面から作られている。後者の界面での価電子帯の band offset は約 0.3eV となり、この界面の存在が SBH を上昇させる理由になっていると考えられる。

発表では、これらの詳細について述べるとともに、 α -Sn 層数と安定性の関係、 β 界面の場合、 α -Sn 層に欠陥が生じた場合についても議論する予定である。

[1] A. Suzuki, et al., Ext. Abs. Int. Conf. Solid State Device and Materials (SSDM2013) (2013)

32. [2] D. T. Wang, et al., Surf. Sci. **343** (1995) 31.

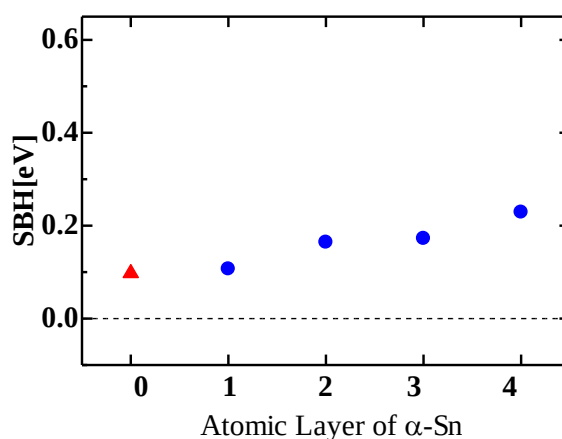


Fig.1 Calculated Schottky barrier height for hole carriers at β -Sn/(α -Sn)_n/Ge(111) interface as a function of layer thickness, n. Dotted line indicates the energy position of valence-band top of bulk Ge.