

量子化と歪みでシリコンはどこまで変わるか？-基礎物性の立場から-

How far can Silicon go? -From a fundamental point of view-

奈良先端大, °武田さくら

NAIST, °Sakura Nishino Takeda

E-mail: sakura@ms.naist.jp

“古くさい半導体”、“シリコンのバンドなんて既によく知られている”というのがシリコンとその電子状態に対して本会参加者の多くが持つ印象ではないだろうか。実際、シリコンのバンド分散については、60年前の $k \cdot p$ 摂動法の開発やその後の第一原理計算の発展を通じおおよそのことが解明されている。しかし、MOSFET が極微細化され、更に量子化や歪みが導入されている現在、それら進化したシリコンのバンド分散について、改めて明らかにする必要がある。

本講演ではシリコン反転層中の量子化電子状態、及び歪みシリコンの電子状態について実験的に調べ、近年新たにわかったことを報告する。実験は表面から深さ 10 \AA 程度の表面近傍領域の価電子バンド分散を実測することが可能な高分解能角度分解光電子法(HR-ARPES)を用いて行った。

【量子化】微細 MOSFET のチャンネルとなる反転層では、電子は深さ数 nm の閉じ込めポテンシャル内で定在波を形成し、面内方向でのみ運動する。このとき面内のバンド分散は、量子化で多重となったバンド分散 (サブバンド) となる。講演者らは HR-ARPES を用いて反転層中サブバンド分散を系統的に測定してきた[1]。その結果、サブバンドの有効質量が、対応する方位のバルクバンドより重いことが判明した。実験的に決定した原子構造を用いた大規模第一原理計算の結果、この重いサブバンドはバルクバンド射影端と一致することが明らかになった。このことから、反転層中では電子がポテンシャル障壁で 0 次の回折 (反射) を受けることにより、これまでに報告されていない干渉機構による新しい電子状態が生じていることがわかった。

【歪み】2 軸引っ張り歪みの印可されたシリコンの価電子帯頂上は重い正孔バンドと軽い正孔バンドのエネルギーシフトにより縮退が解けることが知られている。SiGe 上 2 軸歪み Si について ARPES で価電子帯頂上を測定した結果、実際に縮退の解けが観測されたがエネルギーシフトは理論的な予測より少なかった。近年報告されている内部歪みの効果[2]が重要だと考えられる。

このように電子状態の実測から、量子化や歪みの影響を受けた進化系シリコンでは想定外な現象が生じていることがわかった。「量子化と歪みでシリコンはどこまで変わるか？」という問いには「ノーマルシリコンとはだいぶ違う模様、限界はまだまだわかりません」という答えが適切であろう。研究者のシリコン離れの顕著な昨今であるが、シリコンの研究もまだまだ必要である。

本研究は STARC 助成金、及び科学研究費補助金(No. 22540332, 24360018)により行われた。本研究の一部は琉球大の稲岡毅教授 (電子状態の大規模第一原理計算) 及び産総研の白澤徹朗氏 (LEED I-V 測定による原子構造決定) との共同研究の成果である。

[1] S. N. Takeda *et al.* Phys. Rev. Lett. **94**, 037401 (2005), Phys. Rev. B **93** 125418 (2016)

[2] T. Inaoka *et al.* J. Appl. Phys. **115**, 063702 (2014)