TiN/Ge 界面のショットキーバリアに関する第一原理計算による検討

First-principles study on Schottky barrier at TiN/Ge interfaces

千葉大理 [1], °(M1)西本 俊輝 [1], 中山 隆史 [1]
Chiba Univ.[1] °Toshiki Nishimoto[1], Takashi Nakayama[1]
E-mail: adma1796@chiba-u.jp

高移動度で IV 族の Ge は次世代電子デバイス材料として期待されている。しかし Ge はバンドギャップが小さいために、多くの金属電極に対して正孔の Schottky Barrier Height (SBH)が約 0.1 eV と、Ge の価電子帯近くに pinning してしまい、n-Ge への低い接触抵抗が得られないという問題がある[1]。一方その例外として、Fe_3Si/Ge、Sn/Ge、metal/GeO_2/Ge、germanide/Ge、TiN/Ge 等の界面では pinning が破れることが見いだされている。我々はこれまでに、第一原理計算を用いて、前３者の界面に対し pinning が破れる原因を明らかにしてきた[2,3,4]。今回は、TiN/Ge 界面に注目し、第一原理計算を用いてその起源を検討する。

Ge に TiN を蒸着すると 1nm 程度の準安定な a-TiN の界面層が形成されること、N を多く供給した場合には pinning が破れるが、高温でアニールした界面層のない急狭な TiN/Ge 界面では pinning が起きることが報告されている[5]。特にアニールすると界面層が消えることから、界面層は準安定な構造と考えられる。また TiN は Ge と格子整合すると圧縮歪を受ける。そこでまず定性的な変化を調べるために、窒化した表面上に Ti が欠損した N-rich な TiN 界面層を持つ様々な (1×1) TiN/Ge (001)界面模型を作り、密度汎関数理論に基づく第一原理計算（VASP code）を用いて、SBH の計算を行った。

Fig.1 にいくつかの界面層構造に対する SBH の値を示す。界面層のない TiN/Ge 直接界面では pinning が起きていることが分かる。この結果は実験と一致する[5]。一方、Ti の欠損した界面層では pinning は外れ、特に N-rich な界面層では 0.4eV を越える SBH が得られた。電荷密度を解析することで、SBH のこの変化は、Ge 層から界面層に電子が移動して、界面に dipole が生じたためと分かる。

実験的には、Ge が界面層に混入することも示唆されている。そこで講演では、TiGeN 組成や Ti-rich な界面層も系統的に比較して、pinning が破れる原因について議論したい。

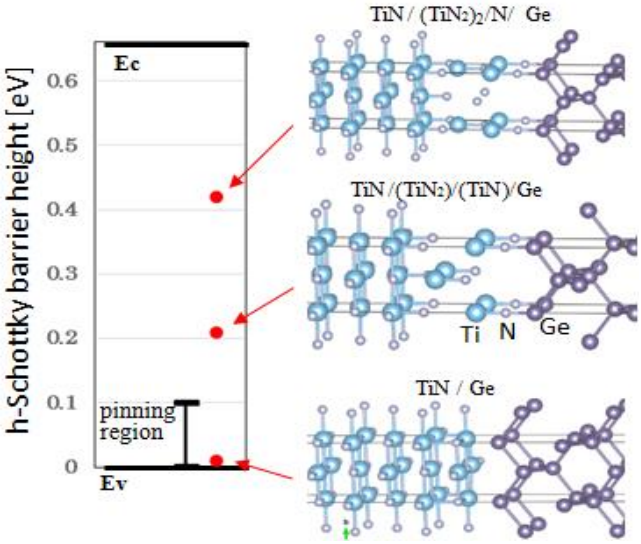

Fig.1 Calculated Schottky barrier height for holes at TiN/Ge(001) interfaces with various N-rich TiN interface layers.

[1] T.Nishimura et al., Appl. Phys. Lett. 91 (2007) 123123. [2] K.Kobinata et al., Jpn. J. Appl. Phys. 53 (2014) 035701. [3] T.Nakayama et al., ECS trans. 75 (2016) 643. [4] S.Sasaki et al., Jpn. J. Appl. Phys. 55 (2016) 111302. [5]K.Yamamoto et al., Appl. Phys. Lett. 104 (2014) 132109.

© 2017年 応用物理学会