

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II –乱れた界面の効果-

First-principles study on Schottky barrier at TiN/Ge interfacesII –Effects of disorder-

千葉大理¹, [○](M1)西本 俊輝¹, 中山 隆史¹,Chiba Univ.¹ [○]Toshiki Nishimoto¹, Takashi Nakayama¹,

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、多くの単体金属電極に対して正孔の Schottky Barrier Height (h-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、Fe₃Si/Ge、Sn/Ge、metal/GeO₂/Ge、germanide/Ge、TiN/Ge 等の界面では pinning が破れる(depining する)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 depinning する原因を明らかにしてきた[2-4]。本研究では、第一原理計算により TiN/Ge 界面の SBH について検討する。

Ge 基板に TiN を低温の N-rich 環境下で蒸着すると 2 nm 程度の準安定な a-TiNGe の界面層が形成され depinning するが、高温で蒸着した場合には界面層が薄くなり pinning することが実験により報告されている[5]。前回の我々の講演では、TiN を Ge 上に圧縮して積層した(1×1)/TiN/Ge(001)で h-SBH を計算し、N-rich 界面層を挟んだ場合には depinning すること、原因は MIGS(Metal Induced Gap State)遮蔽と N←Ge 向きの電子移動による dipole 発生であることを示した。今回は、同圧縮歪の 2×2, 3×3 模型を用いて Ge-N 結合の切れた乱れた界面の h-SBH を求めた。計算には密度汎関数理論に基づく第一原理計算(VASP code)を用いた。

Fig.1 に、2 種の N-rich 界面層を挟んだ TiN/Ge 界面の h-SBH の値と N-Ge 結合欠陥比率の関係を示す。界面乱れが大きくなると pinning に近づくが、どちらも約 10%欠陥が生じて depining していることがわかる。この結果は、Ge 表面に N 終端が起き、格子不整により amorphous 層が形成されると考えると、N-rich で終端が完全でなくても depinning することを意味する。実験では界面層に Ge が混入することも示唆されている。講演では、Ge を含んだ Ge₃N₄、TiGe 界面層についても議論する。

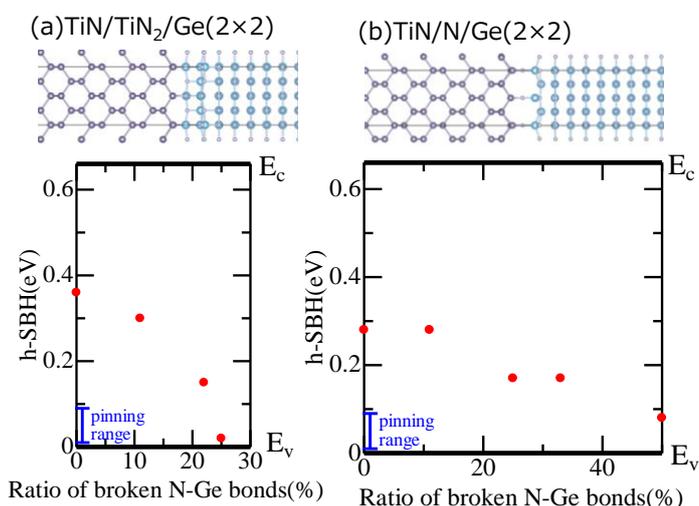


Fig.1 Calculated h-SBH at (a) TiN/TiN₂/Ge and (b) TiN/N/Ge interfaces as a function of broken ratio (%) of interface Ge-N bonds.

- [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.