

Schottky 界面における Two-band MIGS モデル

Two-band MIGS model at metal/semiconductor interface

東大院工 °西村 知紀, 矢嶋 越彬, 鳥海 明

The Univ. of Tokyo, °T. Nishimura, T. Yajima, and A. Toriumi

E-mail: nishimura@adam.t.u-tokyo.ac.jp

【背景】我々は Fermi-level Pinning (FLP) の起源の 1 つとされる波動関数の浸み出しに由来した Metal-induced gap states (MIGS) が、界面形成によって変調しその程度が金属の自由電子密度に依存する金属の仕事関数に対応すると考えている。しかしながら、真空仕事関数の場合には真空レベルという $\sim 5\text{eV}$ 程度の障壁における浸み出しを考える一方、FLP が強い半導体の Schottky 障壁の場合には例えば Ge では約 0.5eV 程度の障壁しかなく、ほぼ 10 倍の障壁高さの違いはトンネル効果に膨大な差を与え、このモデルによる MIGS モデルに基づく FLP の説明は定量的におかしいという議論もある。

しかしながら、真空の場合と異なり半導体の場合には価電子帯も考慮せねばならず、このことは上記の考え方も変更を余儀なくするであろう。そこで、今回は単純に金属より半導体への電子のエバネッセントだけでなく価電子帯の影響を積極的に考えて 2 バンドモデルで MIGS を考察した。

【モデルの概要】Figure 1(a)にモデルの概要を示す。ポイントは半導体の伝導帯へのカップリングを考えたエバネッセントと、価電子帯へのエバネッセントを考えたときの形成されるダイポールは逆向きになり、大きさがキャンセルされることであり、しかもその大きさが釣り合ったところが電荷中性準位に対応するのではないかという点である[1]。つまり、2 種類のエバネッセントが半導体のエネルギーバンドギャップ中に形成され、それぞれがダイポール形成に寄与している(Fig. 1(b))。以前に白石らは一般化された FLP として取り扱った金属と伝導帯、価電子帯の軌道との結合を取り扱ったが[2]、今回のモデルではギャップ内である禁制帯での仮想的浸み出しを個々のバンドに対して取り入れる試みである。実際に定量的な値を出すためにはより詳細な計算が必要であるが、従来あまりにも単純化された MIGS のみが議論されてきたことを鑑みると、今回のモデルは MIGS を現実的なモデルとして取り扱う上で重要な考え方ではないだろうか。

【結論】MIGS における波動関数の浸み出しを半導体の伝導帯と価電子帯の 2 つのバンドについて考慮することによって、真空表面における真空仕事関数から半導体界面における FLP を金属仕事関数の変調効果として統一的に描像できる可能性を示した。

【謝辞】本研究は JSPS 科研費基盤研究(C) JP17K06374, ハーモニック伊藤財団, 及び JST-CREST JPMJCR14F2 の支援を受けて行われました。

[1] W. A. Harrison, “固体の電子構造と物性”, (現代工学社, 1984). [2] K. Shiraishi, et al., IEDM 2005.

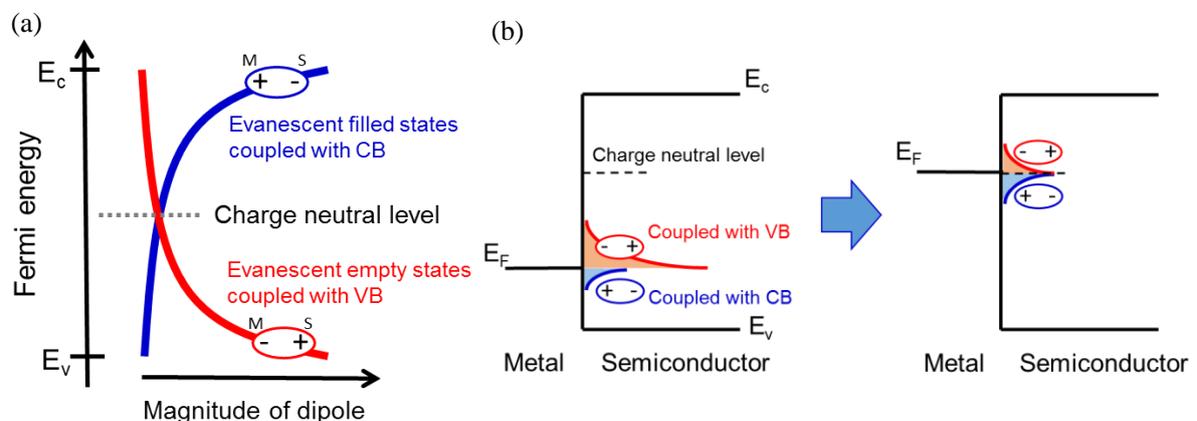


Figure 1 (a) The magnitude of dipoles coupled with conduction band and valence band of semiconductor at metal/semiconductor interface as a function of Fermi energy level of metal at the interface. At metal/semiconductor interface, the two dipoles can induce Fermi-level pinning to charge neutral point of semiconductor. (b) Band alignment at metal/semiconductor interface with Strong Fermi-level pinning to charge neutral by the bi-directional dipoles.