

二次元層状金属 NbS₂ の実効仕事関数評価

NbS₂ as a TMDC metal with a high effective work function

産総研 先端半導体研究センター¹, 明治大², 明治大 MREL³

堀 幸妃^{1,2}, 張 文馨¹, 入沢 寿史¹, 小椋 厚志^{2,3}, 岡田 直也¹

AIST SFRC¹, Meiji Univ.², MREL³ K. Hori^{1,2}, W. H. Chang¹, T. Irisawa¹, A. Ogura^{2,3}, N. Okada¹

E-mail: hori-koki@aist.go.jp

【背景】半導体の遷移金属カルコゲナイド (TMDC) は、数原子層の厚さで高いキャリア移動度を有し、微細 CMOS のチャネル材料として期待されている。しかし、微細トランジスタの高性能化には、ソース/ドレイン (S/D) 部でのコンタクト抵抗低減が必要である。我々は、TMDC チャネル向けのコンタクト材料として、金属の TMDC に着目しており、これまでに、Nb を 600 °C 以上の H₂S 熱処理することで、二次元層状金属の NbS₂ を形成できることを示している[1]。第一原理計算からは、NbS₂ が WSe₂ とヘテロ積層構造を形成することで、低抵抗コンタクトの実現が予測されている[2]。現に、我々は、WSe₂ チャネルに対して、NbS₂ を S/D 部のコンタクト材料として利用することで、WSe₂-pFET のオン電流が向上することを報告している[1]。この性能向上の要因を明らかにするために、本研究では、熱酸化膜 (SiO₂) /Si 基板上に NbS₂ を H₂S 熱処理により形成して、MOS キャパシタを作製し、フラットバンド電圧 V_{fb} から NbS₂ の実効仕事関数 (eWF) を調べた。

【実験】SiO₂ (膜厚 $t = 24\text{--}98\text{ nm}$)/ n -Si ($\sim 5\ \Omega\cdot\text{cm}$) 基板上へ Nb ($t = 3\text{ nm}$) を蒸着法で形成し、H₂S 雰囲気下の熱処理 (圧力: 50 kPa, 熱処理時間: 10 min, 熱処理温度: $T_a = 800\text{ }^\circ\text{C}$) により NbS₂ を作製した。ラマン散乱分光法により NbS₂ の結晶性を評価し、次に、NbS₂ 上に蒸着法で Au 電極 ($t = 50\text{ nm}$) を形成して MOS キャパシタを作製し、容量-電圧 (C - V) 特性の V_{fb} より eWF を算出した。

【結果】SiO₂ 上の Nb は H₂S と反応することで、NbS₂ の E₂ モード (330 cm⁻¹) と A₁ モード (385 cm⁻¹) を示した (Fig.1)。この NbS₂ を電極に用いたキャパシタでは、NbS₂ の膜厚を 5–20 nm で変化させても、 V_{fb} 、および、蓄積領域における C の値はそれぞれ一定の値を示した。これは、NbS₂ が、寄生容量成分が無く電極として機能していることを示している。また、キャパシタの SiO₂ 膜厚依存性より、NbS₂ の eWF は 4.8 eV を示した (Fig. 2)。この値は、Au 電極の eWF = 4.6 eV よりも高く、NbS₂ は Au よりも高い仕事関数を有している。一方、NbS₂ の固有の仕事関数は $\sim 6.2\text{ eV}$ であり[2]、SiO₂ 上の NbS₂ の MOS キャパシタの結果と対応しない。この理由は、WSe₂ 上の NbS₂ が良好な結晶性を示した結果[1]とは対照的に、SiO₂ 上の NbS₂ が理想的な結晶になっていない可能性を考えている。

このような高い仕事関数の二次元層状金属は WSe₂-pFET のコンタクト材料として有望である。これまでに、NbS₂ コンタクトの WSe₂-pFET では、高い仕事関数 ($\sim 5.0\text{--}5.3\text{ eV}$) を有する Ni コンタクトよりも、オン電流が向上することが分かっている[1]。Ni コンタクトの場合には、Ni/WSe₂ 界面でフェルミレベルが WSe₂ のミッドギャップ近傍にピンニング[3]することで、正孔障壁高さが高くなっており、NbS₂/WSe₂ 界面では、van der Waals を介したヘテロ接合を形成することで、フェルミレベルピンニングが緩和され、Ni コンタクトよりも正孔障壁高さが低減していると考えられる。

【まとめ】二次元層状金属である NbS₂ は熱酸化膜上で 4.8 eV の高い eWF を示した。NbS₂ は TMDC チャネル pFET 向けのコンタクト材料として期待できる。

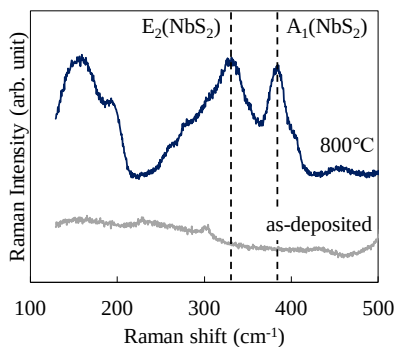


Fig.1 Raman spectra of Nb on SiO₂ after annealing at 800 °C in H₂S atmospheres.

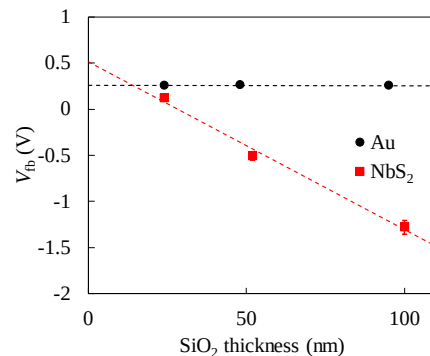


Fig.2 The flat-band voltage V_{fb} of the NbS₂ as a function of the SiO₂ thickness.

【謝辞】本研究の一部は、JST-MIRAI (JPMJMI22708192)、科研費 (JP23K26151)の助成を受けて実施された。

【参考文献】[1] 堀 幸妃 他, 第 71 回応用物理学会春季学術講演会, 25a-71B-9 (2024). [2] X. Ding *et al.*, *Phys. Rev. Applied.* 12, 064061 (2019). [3] D. S. Schulman *et al.*, *Chem. Soc. Rev.* 47, 3037 (2018).