

ショットキー障壁を見積もる際の金属の仕事関数について

Another view of metal work-function at M/S interface for Schottky barrier formation

自由業 ◯鳥海 明, 東京大学 西村 知紀

Free Engineer, Akira Toriumi, Univ. Tokyo, Tomonori Nishimura

e-mail: atoriumi3@gmail.com

金属/半導体(M/S)界面で生じるショットキー障壁(SBH)は, 界面で生ずる Fermi-level pinning (FLP) のために金属の仕事関数と半導体の電子親和力から予測される障壁高さから大きく異なってしまうことがあるとされる. これに関してすでに多くのモデルが提案されている[1]. 今回はこの界面における金属仕事関数について議論したい.

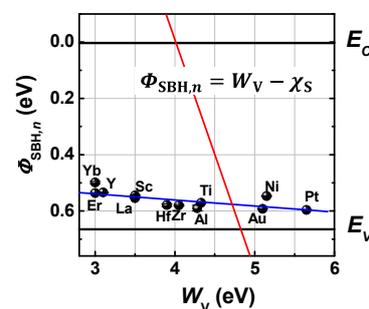
金属の仕事関数 W_V は金属(M)と真空(V)との界面で定義されており UPS や Kelvin 法等によって実験的に多く報告されている[2]. ところが, W_V の中には金属から真空への evanescent-induced dipole (EID) による表面の寄与が含まれており, しかも単純金属ではこの効果は大きい事も報告されている[3]. M/S 界面においては, 真空準位を基準として金属と半導体が接触していると考えて W_V を用いるが, 半導体中では真空とは異なりリアルな波動関数が存在するので, 金属中の電子は半導体中の波動関数と接続する必要があるので. この場合, 金属と半導体の伝導帯および価電子帯とのカップリングを考える事になるので EID という観点で W_V を考えた時ほど単純ではなくなる. その点において, 白石・中山が金属/HfO₂ 界面で伝導帯・価電子帯と金属の波動関数の混ざり合いを正確に取り入れたモデル[5]を M/S 界面へ適用し, それを M/S 界面における金属の表面項としての MIGS と解釈する事はもっともらしい. しかしこの場合にも出発点において仕事関数として W_V を用いると, EID と MIGS の両方を表面項としてダブルカウントしていることになってしまうと考えられる.

そこで, この場合の仕事関数としては EID を除いた金属のバルク成分からの寄与だけを考えて内部仕事関数 W_B を考える. また金属の個性を取り入れると (d 電子, 単純 s 電子の違いとか) 界面に個性が生じるであろう[6]が, まずは金属を自由電子系と考える. その場合, 上記の MIGS モデルというのは EID の代わりに半導体界面における表面項を決める因子として考える事ができることになる. つまり M/S 界面における仕事関数は, 真空準位を基準にした W_V ではなくて, W_B と半導体界面における上記の MIGS 項から構成される W_S であると考えることが妥当ではないだろうか.

pinning factor S を使った従来の扱いでは $\Phi_{SBH} = S(W_V - \Phi_{CNL}) + (\Phi_{CNL} - \chi_S)$ と表されるが, $W_S = SW_V + (1 - S)\Phi_{CNL}$ のように W_S が決まると考えると $\Phi_{SBH} = W_S - \chi_S$ となり, 理想的にはある意味で常に Schottky limit として表される事になる. ここで Φ_{CNL} はバルク半導体の branch point を考えている (W_S が W_V と Φ_{CNL} の線形結合で表されるかどうかは単純ではないが, もっとも低次の近似としては妥当ではないだろうか).

右図は Ge に対する SBH の結果を示す [7]. $S \sim 0$ に近い事はバンドギャップが小さい事で W_S が大きく影響されていると考えれば理解できる. また結果は金属の種類による差が極めてわずかである事を示しており, M/S 界面に存在するかもしれない原子レベルでの個性から考えるよりも W_S の変化と考える方が一般的に理解できるであろう.

今回の考え方はいまだ不十分な議論を多く含んでいるし, 外因性の効果も影響することは間違いないが, M/S 界面という古くて新しい問題に対する取り組みとして従来とは異なる展開にならないかと提案する次第である.



n-Ge における Φ_{SBH} と W_V の関係.

[1]長谷川, 表面科学 **29**, 76(2008). [2] Michaelson, JAP **48**,4729(1977). [3] Lang & Kohn, PRB **3**,1215(1971). [4] Tersoff, PRL **52**, 465(1984). [5]白石&中山, 表面科学 **9**, 92(2008). [6] 平木(私信). [7] Nishimura, APL **91**, 123123(2007).