

論文の内容の要旨

論文題目

ゲルマニウム薄膜に誘起されたフリーキャリアによる
フォノンのソフト化およびバンドギャップ変調に関する研究

株柳 翔一

近年の電界効果トランジスタにおいては、その特性を持続的に向上させるために、半導体部分が三次元的にナノスケール化されるようになってきている。このような状況では、トランジスタ動作させる際にフリーキャリアが半導体部分の全体を覆うことになる。一方で、従来のデバイスモデリングでは半導体の電子構造やフォノン構造といった物性はフリーキャリア密度に依存することはないという、いわゆるリジッドバンドモデルが仮定されてきた。しかしながら、上記のような状況ではこのようなリジッドバンドモデルの妥当性に関して再検討する余地があると考えられる。実際、ドナーやアクセプタといった不純物をドーピングすることによってバンドギャップの狭化やフォノンのソフト化といった現象が起こることが古くから知られており、このような現象に不純物ドーピングによって生成されるフリーキャリアの効果が寄与していることは以前から示唆されている。

このような背景を踏まえ、本研究では次世代のナノスケールトランジスタをモデリングする上で重要となる知見を得るため、以下のような順でGe薄膜におけるフリーキャリアによる物性変調機構を明らかにすることを目指した。ここで、Geという半導体材料を選択した理由については後述する。

はじめに、チャンネル長が数nmオーダーとなる次世代のナノスケールトランジスタにおいては、接合レストランジスタというpn接合を持たない新型トランジスタが有望視されることに着目し、Geを用いた接合レストランジスタの動作実証および高移動度実証を行った。もともとGeはキャリアの有効質量が軽いなどの利点からSiに代わる半導体材料として近年注目されているが、高不純物濃度の半導体をチャンネル部分に用いる接合レストランジスタでは、Geの高い誘電率が長所として働くことがわかり、次世代のナノスケールトランジスタにおけるGeのチャンネル材料としての優位性をより強く示すことができた。

また、デバイスの動作実証をしていく中で、高不純物濃度のGeであっても十分に薄膜化することでフリーキャリアを完全に空乏化できることや、ソースやドレイン電極がゲート電極とオーバーラップしている状況ではオフ状態であっても少数キャリアに由来する急激なリーク電流の増大が起こることが確認できた。これらの知見は、後述する物理測定で大いに役に立つことになった。

そこで次にGeという半導体材料に着目した上で、Ge中におけるドナーやアクセプタの役割を明らかにすることを目指した。具体的には、一般的に半導体を高不純物濃度化した際に観測されると報告されているバンドギャップ狭化やフォノンのソフト化といった現象における、フリーキャリアの効果と不純物原子の効果を実験的に区分けすることを試みた。まずは測定温度を下げて不純物原子密度を固定したままフリーキャリアを凍結させていくことによる区分けを試みたが、この方法ではフリーキャリア密度だけでなく格子物性も変わってしまい区分けが困難であることがわかった。そこで前章で動作実証に成功したGe接合レストランジスタの構造を活かし、Ge薄膜にバックゲート電圧を印加しながら表面側から分光測定を行うという前例のない方法を提示した。これにより測定温度や不純物原子密度は一定のまま、フリーキャリア密度だけを変調させることができ、狙い通りフリーキャリア効果と不純物原子効果を区分けすることにはじめて成功した。その結果、Ge薄膜においてバンドギャップ狭化に対してはフリーキャリア効果と不純物原子効果が同等に寄与しており、フォノンのソフト化に対してはフリーキャリア効果が支配的な要因となっていることが示された。ここで、バンドギャップ狭化現象における不純物原子効果は、不純物バンドの形成として説明できることがわかった。

フリーキャリア密度の増加によってバンドギャップやフォノン周波数が変調されるという実験事実は、従来のデバイスモデリングで信じられていたリジッドバンドモデルが、少なくとも今回のようなGe薄膜では破綻していることを意味する。そこで、本研究ではフリーキャリアによる物性変調機構に重点を置いて議論した。

まずGeの共有結合に着目した化学結合論的なアプローチによって、フリーキャリアが注入されるとエネルギー的に最安定となる原子間距離が変化し、この帰結として結合ギ

ギャップや原子間のばね定数といった物性が変調するという直観的な理解をすることができた。

次にこれを踏まえてより定量的な議論を目指し、ブロッホの定理に基づいたバンド構造を利用した物理的なアプローチを試みた。ここではキャリアの再分配という概念に着目し、バンド理論を用いてフォノンのソフト化を説明することができた。このモデルは1960年頃に既に提案されていたものであるが、50年の時を経てはじめて実験的に実証することができ、ナノスケール化された現代のトランジスタにおいて改めて認識しておかなければいけない知見であることを示せたといえる。さらに、キャリアの再分配が起こるのであれば、フリーキャリアが注入された際には電子系と格子系のエネルギーの総和が最小となるように格子は変形するはずであり、これによってバンドギャップの狭化が起こると考えられることを指摘した。また、第一原理計算による検証を行うことによって、この仮説が妥当であることを示唆する結果が得られた。

本研究で得られた知見は、半導体部分全体がフリーキャリアに覆われることになる次世代のナノスケールにおいて、デバイス特性を正確にモデリング上では極めて重要であると考えられる。フリーキャリアによって物性変調が起きるという事実は今回初めて実験的かつ直接的に示されたが、このことはMOSトランジスタを用いる限り必ず考慮しなければいけない情報であるはずである。また、本研究で示したモデルは将来的にどのような半導体を用いる場合であっても汎用的に説明できるモデルであり、次世代ナノスケールトランジスタのデバイスモデリングに大いに貢献すると信じている。