

研究種目：特定領域研究

研究期間：2006～2009

課題番号：18063003

研究課題名（和文） 第一原理量子論によるナノデバイス材料・界面の物性予測

研究課題名（英文）

First Principles Design of Materials and Interfaces for Future Nano-Devices.

研究代表者

白石 賢二 (SHIRAIISHI KENJI)

筑波大学・大学院数理工学物質科学研究科・教授

研究者番号：20334039

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎

キーワード：理論、ナノサイエンス、界面、新材料、第一原理計算、半導体デバイス

1. 研究計画の概要

本研究の目的は、ポストスケーリング時代に不可欠となる「ナノスケール界面」と「新奇ナノ材料」に関する基礎的知見を、第一原理量子論等によって獲得し、ポストスケーリング時代のデバイス開発にブレークスルーを与えることである。具体的な研究目的は以下の2つである。

- (1) まず、「ナノ界面物理に特有な新しい物理的概念の構築」、及び「新機能をもつ新しいナノ材料開発の設計指針の獲得」を通して界面物理、及び材料科学等の基礎科学の分野に新展開を与える。
- (2) 次に、(1)で我々が獲得した基礎的知見を、本特定領域の実験グループと連携して、「ポストスケーリング時代のデバイス開発に不可欠な新技術、新概念の提案」に結びつける。

2. 研究の進捗状況

(1)

2. 1 ショットキーバリア高さ極限の破綻

これまで「バーディーン極限」と「ショットキー極限」がショットキーバリア高さにおける絶対的な極限として信じられてきた。我々は界面の選択的な軌道混成と界面構造を第一原理量子論等で詳細に検討することにより、上記2つの極限は本当の極限ではないことを理論的に明らかにした。さらに、ショットキー極限の破綻については広島大学

の宮崎教授グループと連携して実験的にも検証し、界面物理学に新しい展開を与えることに成功した

2. 2 ナノキャパシタンスの量子効果

ポストスケーリング半導体テクノロジーにおいては、ナノ構造での物理量の同定が極めて重要である。中でもキャパシタンスはその一例である。我々は第一原理量子論に基づく、ナノキャパシタンス計算手法を昨年度に定式化した。本年度は昨年得たゲートオールアラウンド型のナノキャパシタンスに加え、フロントゲート型のナノキャパシタンスの計算を行った。その結果、ゲートオールアラウンド型と同様、フロントゲート型においても一次元の状態密度の発散に起因する独特の特異なキャパシタンスの振る舞いを見せることを明らかにした。

2. 3 ナノ領域の電子の動的物性の新展開

集積回路は、半導体デバイスの微細化、高集積化を進めることで性能の向上が継続的に図られている。これは、1つの信号あたりの情報量を保ったままでのデバイスサイズ縮小を意味しており、ゆえに微細化と共にデバイス内部で処理される電子の電荷密度は高くなるを得ない。しかし、一方でデバイスサイズ縮小は、デバイスを駆動するための電子数の減少も同時にもたらす。これらの事柄は、集積回路を構成するデバイスの性能を少数個

の電子による駆動によって保つという、大きな課題が生じつつあることを意味している。

それゆえ、デバイス内部での個々の電子の動力学を理解することが今後、益々重要になり、それに見合ったデバイス動作（信号処理技術）が必要となると考えられる。この課題はポストスケール時代最大の課題の一つとなると考えられる。本研究では当該課題を考える上で重要となる「ナノ領域における電子物性の特徴」を量子電子ダイナミクス等によって考察した。

我々は、将来のデバイスにあらわれる諸問題を内包した系として、Siナノドットフローティングゲート構造への電子注入過程を実験、理論両面から検討した。この系においては電子がMOS構造の反転層から、絶縁膜を介したトンネルによりナノサイズのSiナノドットへ注入される。その中で我々は、2次元電子ガスからSiナノドットへの電子注入が、従来はないとされてきた直接トンネル領域で温度依存性を示すことを見出した。この現象は、個々の電子の運動を理解することによって初めて理解出来る現象の一つの例であると考えられる。さらに、これまで熱浴として扱われてきた2次元電子ガス中での電子の運動が、トンネル過程に大きな影響を与え、電子注入の温度依存性の主な原因となりうることを見出した。

(2)

2. 4 ショットキー障壁高さの制御指針

平衡プロセス（高温プロセス）でCMOS構成が可能なプロセスを模索した。その結果、Si基板側の界面を制御することは有効な指針となることを示すとともに、酸素を導入して酸素空孔を消滅させる手法について特に考察した。その結果、フェルミレベルピンングが起こっている状況では酸素空孔を消滅させる反応は基板のSiを酸化する反応と熱力学的には等価であることを証明した。この結果は、酸素空孔の消滅と有効絶縁膜厚の増加はトレードオフの関係にあり、酸素空孔だけを消滅させるプロセスウインドーは極めて狭いことを明らかにした。上記考察は、酸素注入による酸素空孔の消去を行うプロセスは、集積化を目指した手法としては望み薄であることを意味している。

3. 現在までの達成度

①当初の計画以上に進展している。
(理由)

これまでにナノ界面・ナノ材料分野におい

て大きなブレークスルーを得たと考えている。(1) 従来の界面物理学の常識を覆す新しい2つの概念構築に成功したこと、(2) ナノ構造におけるキャパシタンスの量子効果を炭素ナノチューブ構造で具体的に明らかにしたこと、(3) 次元の異なる系間の電子トンネル現象において予期せぬ温度依存性を見出したこと等、さらには、デバイス特性につながりながらショットキー障壁高さの制御指針つながる研究成果も得られている。これら一連の成果は当初の予想をはるかに上回る成果であると考えている。

4. 今後の研究の推進方策

最終年度である平成21年度はこれまでの成果の総まとめを行うとともに、平成20年度に見出した次元の異なる系間の予期せぬ電子トンネル現象の起源を解明する。こうした研究を通してポストスケール時代には不可欠となる概念構築を目指す予定です。

5. 代表的な研究成果

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 57 件)

- [1] K. Uchida, S. Okada, K. Shiraishi, and A. Oshiyama, "Quantum effects in a double-walled carbon nanotube capacitor", PHYSICAL REVIEW B, 76 (15): Art. No. 155436 OCT 2007.
- [2] N. Umezawa, K. Shiraishi, et al., "Suppression of oxygen vacancy formation in Hf-based high-k dielectrics by lanthanum incorporation", APPLIED PHYSICS LETTERS, 91 (13): Art. No. 132904 SEP 2007.
- [3] K. Uchida, S. Okada, K. Shiraishi, and A. Oshiyama, "Quantum effects in a cylindrical carbon-nanotube capacitor", JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER, 19 (36): Art. No. 365218 SEP 2007.

[学会発表] (計 110 件)

- [1] [Invited] T. Nakayama, "Schottky barrier and stability of metal/high-k interfaces; theoretical view", Int. Conf. Solid State Devices and Materials, Sep.19-21, 2007, Tsukuba, Japan.
- [2] [Invited] K. Shiraishi, Y. Akasaka, G. Nakamura, T. Nakayama, S. Miyazaki, H. Watanabe, A. Ohta, K. Ohmori, T. Chikyow, Y. Nara, K. Yamabe, and K. Yamada, "Theoretical Studies on Metal/High-k Gate Stacks", 211th Meeting of Electrochemical Society, Chicago, USA, (May 7-10, 2007).

[その他]

研究項目 A04 の宮崎教授グループと20年度だけで、計23件の共同研究発表を行った。これは特定領域研究の組織を最大限に有効利用したものである。