

令和 6 年 6 月 24 日現在

機関番号：32660

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K04158

研究課題名（和文）テラヘルツ帯トランジスタのためのInAsSbチャンネル量子井戸構造成長に関する研究

研究課題名（英文）Study on the growth of InAsSb channel quantum well structures for terahertz transistors

研究代表者

遠藤 聡 (ENDO, Akira)

東京理科大学・先進工学部電子システム工学科・客員教授

研究者番号：60417110

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：AlInSb/InAsSb量子井戸構造は、電子密度が高くチャンネル電子の有効質量が軽い。そこで低電界モンテカルロ計算を行い、電子移動度、電子密度の可能性を推測した。更には第一原理計算から、InAsSbにおいて特徴的なバンドギャップの大きな負方向への湾曲が、 Γ -L間、 Γ -X間のエネルギーにおいても起こることを見出した。また、実際にInAsSb薄膜を作製するためのV族元素の混晶組成制御の方法を確立した。低温InSb、AlSb、Al_{0.4}In_{0.6}Sbバッファ層上に成長温度とAs組成を変化させてInAsSbを成長した。現時点でのInAsSb中の電子移動度の最高値は約15,000 cm²/Vsである。

研究成果の学術的意義や社会的意義

未開拓周波数帯域であるテラヘルツ帯（0.1～10 THz）は、高速大容量無線通信、センシング、非破壊検査、分光分析等の多方面に渡る応用が期待されている。テラヘルツ帯で動作可能なトランジスタの一つに、高電子移動度トランジスタ（High Electron Mobility Transistor: HEMT）がある。HEMTに用いる半導体量子井戸構造として、チャンネル層にInAsSb、バリア層にAlInSbを用いると、最高速のトランジスタとなる可能性がある。今回の成果は、AlInSb/InAsSb量子井戸構造による最高速トランジスタの可能性を示し、テラヘルツ帯応用における最も基本的なデータとなる。

研究成果の概要（英文）：AlInSb/InAsSb quantum well structures have high electron density and channel electrons have light effective mass. We carried out low-electric-field Monte Carlo simulations to estimate the possibility of electron mobility and electron density. Furthermore, we found from first-principles calculations that the characteristic large negative curvature of the band gap in InAsSb occurs at energies between Γ -L and Γ -X. We also established a method to control the mixed crystal composition of group V elements to grow InAsSb thin films. We grew InAsSb on low-temperature InSb, AlSb, and Al_{0.4}In_{0.6}Sb buffer layers by changing the growth temperature and As content. The highest electron mobility in InAsSb at present is approximately 15,000 cm²/Vs.

研究分野：ナノ電子・光半導体材料

キーワード：テラヘルツ帯 計算 バンド構造計算 InAsSb 量子井戸構造 分子線エピタキシー法 電子移動度 電子密度 モンテカルロ

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

1. 研究開始当初の背景

近年、未開拓周波数帯域であるテラヘルツ帯(0.1~10 THz)が注目されている。テラヘルツ帯においては、高速大容量無線通信に加え、センシング、非破壊検査、分光分析等の多方面に渡る応用が期待されている。テラヘルツ帯の活用には、この帯域で動作する超高速トランジスタが必要である。この要求を満たす超高速トランジスタの一つに、高電子移動度トランジスタ(High Electron Mobility Transistor: HEMT)がある。HEMTの高速化には、電子の有効質量が軽いチャンネル材料を用いる必要がある。Ⅲ-Ⅴ族化合物半導体においては、InSbにおける電子の有効質量が最も軽い。一方、HEMTに高密度の2次元電子ガスを溜めるという観点からは、チャンネル材料とバリア材料のバンドギャップエネルギーの差が大きい深い量子井戸が必要である。InAsやInSbは電子の有効質量が軽く、超高速HEMTのチャンネル材料として有望である。両半導体の混晶であるInAsSbは、バンドギャップエネルギーがⅢ-Ⅴ族化合物半導体において最小になる組成があり、InAsSbをチャンネル層、AlInSbをバリア層として量子井戸(HEMT)構造を作製した場合、高密度の電子をチャンネル層内に閉じ込めることが可能である。更に、InAsSbにおける電子の有効質量はInSbにおける値よりも軽くなり、電子移動度や電子速度はⅢ-Ⅴ族化合物半導体において最大になる可能性がある。InAsSbチャンネルHEMTに関しては今迄に幾つかの報告があるが、高電子移動度と高電子密度の両立という点においては不十分である。これは、AsとSbというⅢ族元素の混晶における組成制御の難しさ、InAsSbにおいては相分離が起こる場合があることに起因する。そのため、AsとSbの精密な組成制御と高品質な量子井戸(HEMT)構造の形成技術が必要である。

2. 研究の目的

本研究においては、分子線エピタキシー(Molecular Beam Epitaxy: MBE)法により、高電子移動度・高電子密度を有するAlInSb/InAsSb格子整合系量子井戸構造を作製することが目的である。本材料系では、Ⅲ族元素とⅤ族元素の混晶層が存在するため、混晶半導体の組成や各層の厚さの厳密な制御が必要であり難しい材料系である。そのため、実験と合わせてシミュレーションによる特性予測が必要である。VASP(Vienna Ab initio Simulation Package)等の第一原理計算によりInAsSbのバンド構造を求めてInSbやInAsの値と比較する。更に、得られたバンドパラメータを元にAlInSb/InAsSb格子整合系HEMT構造(量子井戸構造)のモンテカルロ法デバイスシミュレーションを実行し、特性の予測や実験結果の解釈に利用し、実験へのフィードバックをかける。そして最終的な目的としては、テラヘルツ帯で動作する世界最高速HEMTに適用可能なAlInSb/InAsSb格子整合系量子井戸構造を実現することにある。

3. 研究の方法

(1) 第一原理計算(VASP等)の活用により、InAsSbのバンド構造を厳密に計算する。方法としては、実験で得られたバンドギャップエネルギーを再現できるように混成密度汎関数理論を用いた計算を行う。
(2) (1)において得られたバンド構造を用いてAlInSb/InAsSb格子整合系HEMT構造(量子井戸構造)のモンテカルロ法デバイスシミュレーションを実行する。電気的特性の予測や実験結果の解釈に利用し、実験へのフィードバックをかける。
(3) MBE法により実際にAlInSb/InAsSb格子整合系量子井戸構造を作製し、その電気的特性(電子移動度、電子密度)を求める。
そして(2)と(3)を繰り返し、AlInSb/InAsSb格子整合系量子井戸構造における電子移動度、電子密度が高まるようにしていく。

4. 研究成果

(1) モンテカルロ法によるInAsSbにおける電子移動度等の計算
InAsSbのバンドギャップエネルギーと Γ バレーにおける電子の有効質量に関しては、約50年前に論文が発表されている。かなり古い文献であるが、InAsSb系量子井戸において電子移動度、電子密度、シート抵抗がどの程度になるか調査しておくことが必要である。そこでInAs_xSb_{1-x}に関して、 $x=0.1\sim 0.7$ (0.1刻み)におけるモンテカルロ計算を行った。図1(a)に電子移動度、(b)に電子密度、(c)にシート抵抗のAs組成依存性を示す。比較の対象として、これまで進めてきたGa_{0.22}In_{0.78}Sbチャンネル量子井戸(HEMT)構造の場合の値を示す。電子移動度 μ はAs組成0.1から0.4の範囲でGa_{0.22}In_{0.78}Sbよりも高く、As組成0.2で最高値となっている。また、電子密度 N_s はAs組成が0.2以上でGa_{0.22}In_{0.78}Sbよりも高く、計算した範囲ではAs組成とともに単調に増加している。実際にHEMTを作製した場合、低電界領域ではシート抵抗 $R_s (= 1/\mu N_s e; e$ は単位電荷)が重要であり、これを下げることでトランジスタの寄生遅延時間を低減できる。 R_s は、As組成が0.2~0.6の範囲でGa_{0.22}In_{0.78}Sbよりも低い。そして、As組成0.35程度でシート抵抗は最も低くなっている。

(2) 第一原理計算 (VASP) による湾曲係数の評価

(1) でモンテカルロ計算に用いた論文には、 Γ バレーにおける電子の有効質量とバンドギャップエネルギーが述べられているだけである。弱電界領域では電子は Γ バレーに存在する確率が高いが、トランジスタにした場合には電子のバレー間遷移が起こる。そのため、 Γ -L 間、 Γ -X 間のエネルギーがどの程度であるかが重要である。また、InAsSb で見られるバンドギャップエネルギーの大きな負方向への湾曲が、 Γ -L 間、 Γ -X 間でも起こっているのか把握することが必要である。そこで、VASP を用いて $\text{InAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ のバンド計算 ($x = 0.25, 0.50, 0.75$) を行い InSb や InAs の結果と比較した。計算は、実験で得られたバンドギャップエネルギー E_g を再現できるように、混成密度汎関数理論を用いて混合係数を変化させた。図 2 に、 E_g 、 $E_{\Gamma-L}$ 、 $E_{\Gamma-X}$ の As 組成依存性を示す。 $E_{\Gamma-L}$ 、 $E_{\Gamma-X}$ は $x=0.25$ で最小値となり、これらの値は InSb ($x=0$) の値よりも小さい。このように、負方向への湾曲は E_g だけでなく $E_{\Gamma-L}$ や $E_{\Gamma-X}$ においても起こっている。トランジスタ化した場合には高電界がかかるので、ここで得られた $E_{\Gamma-L}$ 、 $E_{\Gamma-X}$ だけでなく、有効質量も L、X バレーに関して厳密に求めてモンテカルロ計算に使用する必要がある。

(3) MBE 法による InAsSb 結晶の組成制御

本研究の対象である InAsSb においては、As と Sb という V 族元素の混晶における組成制御の難しさがある。チャンネルとなる InAsSb の組成制御をきちんと出来ないと、AlInSb バリア層との間に歪みが生じる。そのため、As と Sb の精密な組成制御と高品質な量子井戸 (HEMT) 構造の形成技術が必要である。As はバルブドクラッカーセルを用いたため As_2 分子、Sb はクヌーセンセルを用いたため Sb_4 分子として照射される。そのため、 As_2 分子と Sb_4 分子を同時に照射する際の付着係数 S は $S_{\text{As}} = 1$ 、 $S_{\text{Sb}} = 0.5$ であると考えられる。よって、理論上は付着係数比 $S_{\text{Sb}} / S_{\text{As}}$ が 0.5 になると予測される。図 3 に、分子線強度比 $J_{\text{As}} / (J_{\text{As}} + J_{\text{Sb}})$ に対する InAsSb の As 組成 x における各付着係数比 $S_{\text{Sb}} / S_{\text{As}}$ の理論曲線と実験値のグラフを示す。ただし、実験値は基板温度 415、390、350 で成長させたものである。また、理論曲線は次式を用いて求めた。

$$x = \frac{1}{1 + \frac{J_{\text{Sb}} \times S_{\text{Sb}}}{J_{\text{As}} \times S_{\text{As}}}}$$

図 3 より、415 の点に着目すると本実験における付着係数比 $S_{\text{Sb}} / S_{\text{As}}$ はおよそ 1 であることがわかる。先ほど予測した付着係数比 0.5 と異なったのは、V 族である As と Sb を同時に照射したために起こる共吸着の影響、また V 族の供給量が Sb-rich であったことが原因であると考えられる。また、As 組成比 0.35 付近の 415、390、350 に着目すると、成長温度が低くなるほど付着係数比 $S_{\text{Sb}} / S_{\text{As}}$ が増加することがわかる。これは Sb の脱離温度が低いことが原因であると考えられる。

以上のような組成制御条件を用いて、バルク InAsSb をバッファ層を変えて成長し、その結晶、電気的特性の評価を行った。

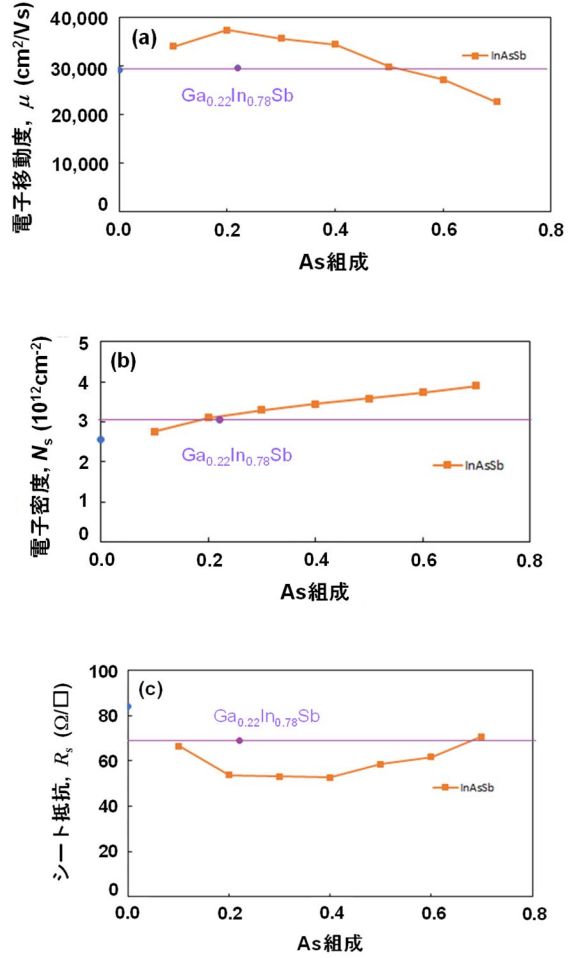


図 1 モンテカルロ計算による(a)電子移動度、(b)電子密度、(c)シート抵抗の As 組成依存性

図 2 InAs_xSb_{1-x} におけるバンドギャップエネルギー E_g 、 Γ -L バレー間エネルギー $E_{\Gamma-L}$ 、 Γ -X バレー間エネルギー $E_{\Gamma-X}$ の As 組成 x 依存性

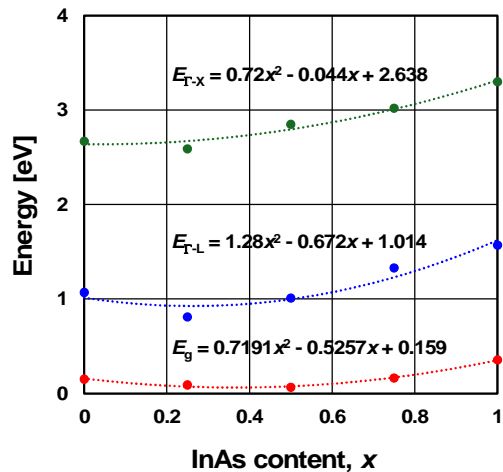


図 2 InAs_xSb_{1-x} におけるバンドギャップエネルギー E_g 、 Γ -L バレー間エネルギー $E_{\Gamma-L}$ 、 Γ -X バレー間エネルギー $E_{\Gamma-X}$ の As 組成 x 依存性

(4) LT-InSb バッファ層上の InAsSb 結晶の成長

InAsSb 結晶は GaAs(100)基板上に成長した。まず GaAs を成長後に LT-InSb (低温成長 InSb) を 30 nm 成長し、この上に InAsSb を 300 nm 成長した。InAsSb 結晶の成長は、成長温度を 415 °C で固定し As 組成比を 0.36、0.42、0.45、0.52 と変化、As 組成比を 0.35 に固定し成長温度を 350、390、415 °C と変化させた。成長温度を高くすると X 線回折における ω スキャン半値幅が狭くなり相分離が抑制されること、As 組成比を下げると ω スキャン半値幅が狭くなり相分離が抑制されることが分かった。図 4 に、LT-InSb 上の $\text{InAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ における(a)電子移動度と(b)電子密度の As 組成比 x 依存性を示す。全体の傾向として As 組成比を低くすると電子移動度が高くなり、電子密度は減少することが分かる。また、今回の目的組成である As 組成比 $x = 0.35$ 付近で成長

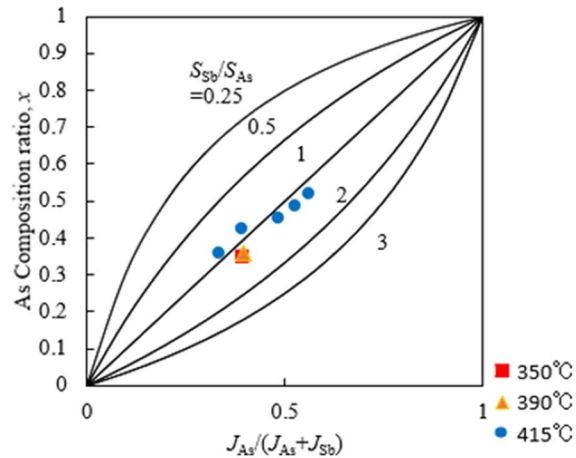


図 3 分子線強度 $J_{As}/(J_{As}+J_{Sb})$ に対する As 組成比 x

温度依存性を見ると、成長温度を高くすることで電子移動度が高くなり、電子密度が減少することが分かる。これは As 組成比を低くするもしくは成長温度を高くすると相分離が起きにくくなり、その影響で転位の発生を抑制し、転位による散乱が減ったためであると考えられる。また、この傾向は前述した X 線回折の半値幅の傾向とも整合している。

(5) AlSb バッファ層上の InAsSb 結晶の成長

InAsSb 結晶は GaAs(100)基板上に成長した。まず GaAs を成長後に GaSb を 175 nm 成長、AlSb を 75 nm 成長し、この上に InAsSb を 500 nm 成長した。InAsSb 結晶の成長は、成長温度を 450 °C で固定し As 組成比を 0.11、0.32 と変化、As 組成比を 0.32 に固定し成長温度 400、425、450 °C と変化させた。成長温度を高くすると X 線回折における ω スキャン半値幅が狭くなり相分離が抑制されること、As 組成比を下げると ω スキャン半値幅が狭くなり相分離が抑制されることが分かった。このように、As 組成比を低くするもしくは成長温度を高くすることで相分離が抑制される。図 5 に、AlSb 上の $\text{InAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ における(a)電子移動度と(b)電子密度の As 組成比 x 依存性を示す。全体の傾向として、As 組成比を低くすると電子移動度が高くなり、電子密度は減少する。また、今回の目的組成である As 組成比 $x = 0.32$ 付近で成長温度依存性を見ると、成長温度を高くすることで電子移動度が高くなり、電子密度が減少することがわかる。これは LT-InSb 上の InAsSb の傾向と同じである。図 5 中のグレー表記は、(4)で得られた LT-InSb 上の 415 °C における結果である。LT-InSb バッファ層上 InAsSb の方が、全体的に電子移動度が高く、電子密度も高くなっていることがわかる。これは LT-InSb バッファ層の場合、低い成長温度で GaAs 基板上に成長させたため、成長の初期核が増加し、成長初期の段階で横方向成長を促進したことで転位の発生が抑制されたためであると考えられる。しかしながら、HEMT 構造の場合には電子をチャンネル層内に閉じ込めなければならないので、AlSb バッファ層のように InAsSb に対して伝導帯が大きく、深い量子井戸とする必要がある。そのため、LT-InSb バッファ層は適切であるとは言い難い。そこで、AlSb 層上に AlInSb 層を制著し、InAsSb チャンネル層と AlInSb バリア層の格子定数を近づける必要がある。

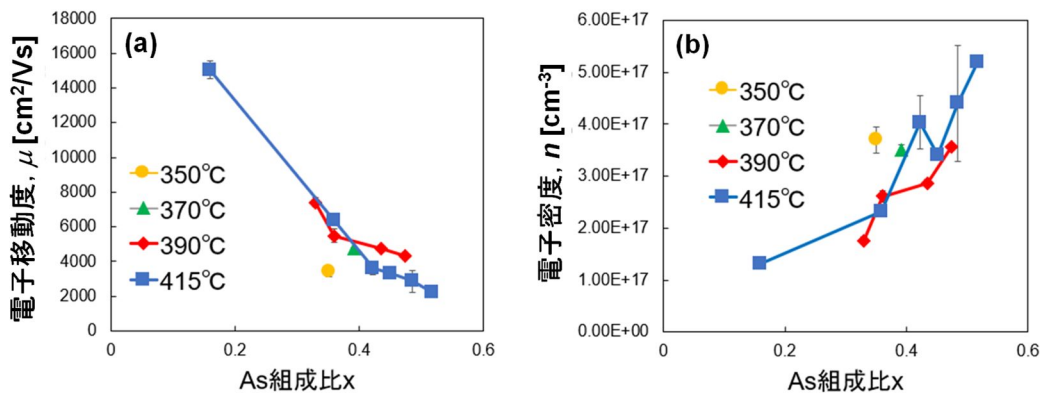


図 4 LT-InSb バッファ層上の $\text{InAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ における(a)電子移動度と(b)電子密度の As 組成比 x 依存性

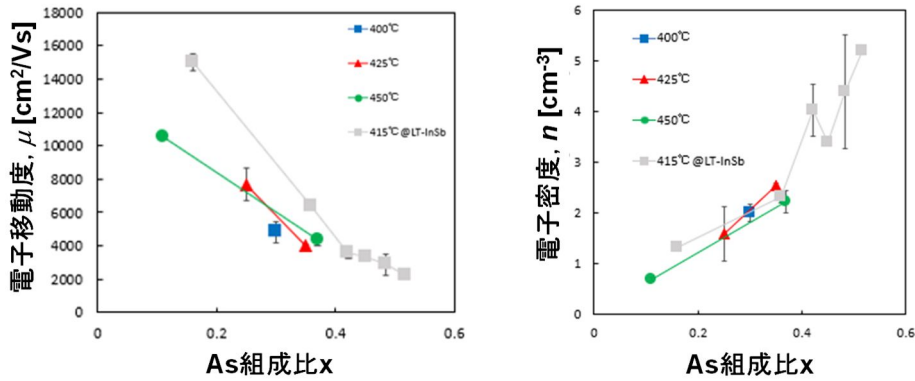


図5 AlSb バッファ層上の $\text{InAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ における(a)電子移動度と(b)電子密度の As 組成比 x 依存性

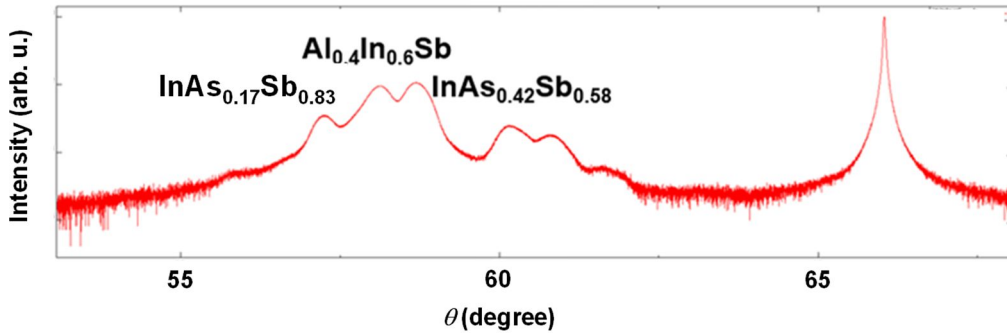


図6 AlInSb バッファ層上 InAsSb の X 線回折 $2\theta/\omega$ パターン

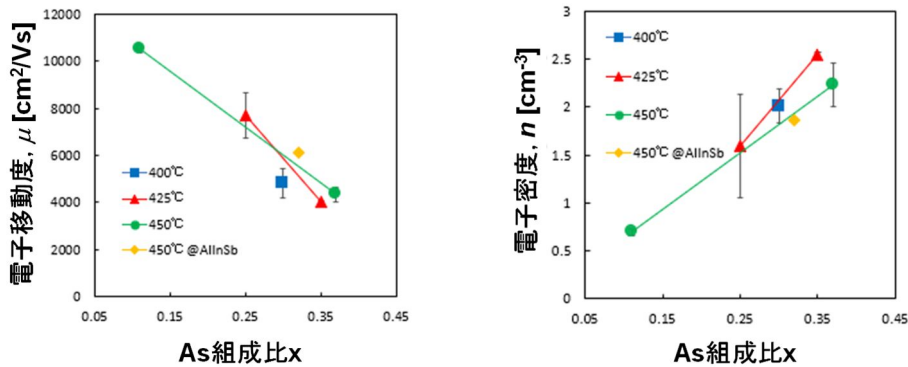


図7 $\text{Al}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Sb}$ バッファ層上の $\text{InAs}_{0.32}\text{Sb}_{0.68}$ における(a)電子移動度と(b)電子密度

(6) AlInSb バッファ層上 InAsSb 結晶の成長

InAsSb をチャネル層とする量子井戸 (HEMT) 構造の場合、バリア層はチャネル層に格子整合する AlInSb であることが望ましく、格子整合系の場合が最も結晶性が良くなる。そこで、AlSb 層上に AlInSb を形成することを試みた。(5)での AlSb バッファ層上に更に $\text{Al}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Sb}$ バッファ層を 1500 nm 成長し、この上に $\text{InAs}_{0.32}\text{Sb}_{0.68}$ 層を 500 nm 成長した。図 6 に、AlInSb バッファ層上 InAsSb の X 線回折 $2\theta/\omega$ パターンを示す。 $\text{Al}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Sb}$ に由来するピークの横に、 InAsSb の組成の異なる 2 つのピークが確認できた。これらは、 $\text{InAs}_{0.17}\text{Sb}_{0.83}$ と $\text{InAs}_{0.42}\text{Sb}_{0.58}$ に相当する。従って、 InAsSb の相分離が発生したことがわかる。相分離のため As 組成の設計値ではないが、図 7 に、 $\text{Al}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Sb}$ バッファ層上の $\text{InAs}_{0.32}\text{Sb}_{0.68}$ における(a)電子移動度と(b)電子密度を示す。相分離により電子移動度、電子密度ともに期待したような値は得られなかった。

< 引用文献 >

- [1] T. Kawasaki *et al.*, unpublished.
- [2] H. I. Fujishiro and A. Endoh, 2023 Activity Report / Supercomputer Center, ISSP, The University of Tokyo (2024).
- [3] 三田他, 第 84 回応用物理学会秋季学術講演会, 21p-P05-8.
- [4] T. Kito *et al.*, unpublished.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 0件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 H. I. Fujishiro and A. Endoh	4. 巻 2023
2. 論文標題 Bowling of Energy Gap Curve for InAsSb Calculated Using VASP Based on Hybrid Density Functional Theory	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Activity Report / Supercomputer Center, Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

〔学会発表〕 計1件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 三田 泰継、小関 敬祐、桑原 笑明、小野田 悠人、遠藤 聡、藤代 博記
2. 発表標題 LT-InSbを用いたGaAs基板上InAsxSb1-x薄膜成長と評価
3. 学会等名 第84回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分 担 者	藤代 博記 (FUJISHIRO Hiroki) (60339132)	東京理科大学・先進工学部電子システム工学科・教授 (32660)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------