

令和 3 年 6 月 9 日現在

機関番号：13301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2020

課題番号：17K06343

研究課題名(和文) 表面終端ダイヤモンドにおけるキャリア輸送特性解析

研究課題名(英文) Analyses of carrier transport properties in surface-terminated diamond

研究代表者

猪熊 孝夫 (Inokuma, Takao)

金沢大学・電子情報通信学系・教授

研究者番号：50221784

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,300,000円

研究成果の概要(和文)：ダイヤモンドは、将来のパワーデバイス用半導体材料としてSiCやGaNを凌ぐ性能が期待されている。本研究の目的は、ダイヤモンドと金属または絶縁体との界面におけるキャリア輸送現象と原子レベルの微視的構造との相関を明らかにすることにある。ダイヤモンドデバイス応用において重要な「金属電極との接触特性」および「MIS構造におけるチャネル伝導」をモデル化した量子輸送シミュレーションを行い、ダイヤモンド表面終端構造とキャリア輸送特性との相関を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ダイヤモンド表面の水素/酸素終端構造の理論的研究に関しては、主として(100)、(111)面等の低指数面上で何種かの平衡構造、エネルギー(安定性)の差異が研究されている。しかしながら、こうした終端構造上に金属・絶縁体等の異種物質を重ねた場合の微視的構造および界面電子状態に関する研究についてはこれまで例がなく、本研究ではさらにキャリア輸送特性にまで踏み込んだ研究を行うことから、デバイスの電気的特性に直接関連する知見を得ることができた。本研究で得られた成果はダイヤモンドデバイス開発にフィードバックされ、技術革新に結びつくことが期待される。

研究成果の概要(英文)：Diamond is expected to outperform SiC and GaN as a semiconductor material for future power devices. The purpose of this study was to clarify the correlation between the carrier transport phenomena and the atomic-scale structures at the interface between diamond and metal/insulator. Quantum transport simulations were carried out for the models representing "contact with metal electrodes" and "channel conduction in MIS structures", which are substantially important for diamond device applications. The carrier transport properties of surface-terminated diamonds were revealed.

研究分野：薄膜物性

キーワード：ダイヤモンド 表面・界面 量子輸送 密度汎関数法

### 1. 研究開始当初の背景

ダイヤモンドは、約 **5.5eV** のバンドギャップをもつワイドギャップ半導体であり、キャリア移動度、絶縁破壊電界、そして熱伝導率の高さから、将来のパワーデバイス用半導体材料として **SiC** や **GaN** を凌ぐ性能が期待されている。近年、半導体として利用可能な高品質単結晶の成長技術が確立されつつあり、世界的な電力消費削減の機運とともにダイヤモンドへの注目度も高まっている。しかし、ダイヤモンドデバイス開発をさらに進展させてゆく上で従来からの課題も残されており、その一つとしてダイヤモンド表面近傍の電気的特性と表面終端構造との相関の包括的な理解が挙げられる。以上のように、これまで申請者はダイヤモンド表面の吸着化学種の挙動に関する理論的研究に注力してきた。こうした成果が、デバイス技術開発に一層貢献するためには、キャリア輸送特性と表面終端構造を関連づけることが必須と考え、本研究課題を着想するに至った。

### 2. 研究の目的

本研究は、ダイヤモンドと金属または絶縁体との界面におけるキャリア輸送現象と原子レベルの微視的構造との関連を明らかにすることを目的とした。そのために、デバイス応用において重要な「金属電極との接触特性」および「**MIS** 構造におけるチャネル伝導」をモデル化し、界面の微視的構造と電気的特性との相関を研究した。これらの結果を解析し、デバイス特性の向上あるいは劣化に關与する本質的要因の解明を目指した。

### 3. 研究の方法

計算には密度汎関数法プログラム **OpenMX** を用い、微視的構造に基づいたキャリア輸送特性を理論的に解析するために、密度汎関数法による第一原理電子状態計算と非平衡グリーン関数 (**NEGF**) 法による量子輸送シミュレーションを組み合わせた。ダイヤモンド (**111**), (**100**) および (**110**) の各低指数面上へ金属 **Au, Al** を積層し、ダイヤモンド表面の終端化学種 (**-H, -OH, =O** 等)、原子ステップの有無等をパラメータとした計算を行った。これにより、量子輸送特性解析のベースとなる界面電子状態のデータを得る。さらに、**OpenMX** に実装されている **NEGF** 法プログラムを用いて、ダイヤモンド表面に垂直方向および平行方向の電子輸送特性について解析した。

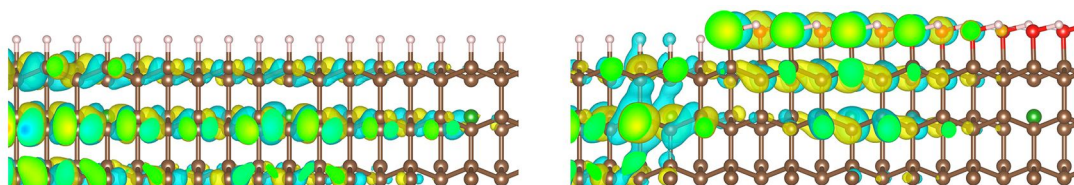
### 4. 研究成果

#### 1) 表面終端ダイヤモンドと金属の接触界面の電子状態と電気伝導

ダイヤモンド/金属界面の構造最適化と電子状態計算を行った。ダイヤモンド (**111**) 表面を **-H, -OH, =O** の各化学種にて終端した上へ **Au** または **Al** を 2 原子層積層し、ダイヤモンド/金属界面の計算モデルを構築した。このモデルを構造最適化し、界面近傍の原子に関する部分状態密度に着目して電子状態の解析を行った。特に静電ポテンシャルの 3 次元分布に注目して解析を行い、表面終端構造によって変化する電子親和力(ダイヤモンド)・仕事関数(金属)について調べた。その結果、水素終端ダイヤモンドは負の電子親和力を持つことが実験的に知られているが、本研究における解析結果もそれを支持する結果が得られた。表面終端構造によってダイヤモンド表面に電気二重層が形成され、それらの差異によって電子親和力等に変化が生じていることがわかった。

#### 2) 表面終端ダイヤモンドにおける表面電気伝導

水素終端面および水酸基終端面、無終端表面について表面に平行な方向の電子輸送特性について **NEGF** 法を用いて計算し、フェルミ準位近傍のエネルギーにおけるキャリア輸送チャネルおよび透過率について解析した。図 1 (a), (b) は、それぞれ水素終端および水酸基終端したダイヤモンド (**111**) 表面のキャリア輸送固有チャネルを等値面プロットしたものである。水素終端表面の場合は、キャリア輸送チャネルはダイヤモンド基部内を通るのに対し、水酸基終端表面においては酸素原子近傍に主たるキャリア輸送チャネルが形成されていることが分かった。図 1 (b) のような固有チャネルは、実験的には確認されていないが、表面のキャリア移動度に影響を与える可能性が高い。



(a) H 終端表面

(b) OH 終端表面

図 1. ダイヤモンド (**111**) 終端表面のキャリア輸送固有チャネル。

#### 3) ダイヤモンド (**111**)-(2x1)再構成表面の伝導度異方性

ダイヤモンド**(111)-(2x1)**再構成表面においては、**1**次元結合鎖が形成されることが知られている。この**(2x1)**再構成表面と**(1x1)**表面のキャリア輸送特性について、**NEGF**法を用いて調べた。その結果、**(2x1)**再構成表面の結合鎖に並行な方向では、垂直な方向に比較して、表面の伝導度が**15**桁以上大きく、**(1x1)**表面と比較しても**10**桁程度大きいという計算結果を得た。こうした**(2x1)**再構成表面の高い表面伝導度と異方性は、新奇な表面伝導デバイス開発に結びつく可能性がある。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計1件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 1件）

1. 発表者名 S. Hoshida, H. Satou, X.F. Zhang, T. Matsumoto, S. Yamosaki, N. Tokuda, T. Inokuma.
2. 発表標題 Carrier transport properties of diamond (111)-(2x1) reconstructed surfaces
3. 学会等名 The 8th International Symposium on Organic and Inorganic Electronic Materials and Related Nanotechnologies (国際学会)
4. 発表年 2021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
連携研究者	徳田 規夫  (Tokuda Norio)  (80462860)	金沢大学・電子情報通信学系・教授     (13301)	

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
---------	---------