

## 自己評価報告書

平成 23 年 4 月 19 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2008 ~ 2011

課題番号：20560300

研究課題名(和文) ゲルマニウムベース高移動度トランジスタのための表面修飾と絶縁体  
/界面改善研究課題名(英文) Ge surface modification and improvement of insulator and interface  
for MISFET having high mobility研究代表者 金島 岳 (KANASHIMA TAKESHI)  
大阪大学・基礎工学研究科・准教授  
研究者番号：20560300

研究分野：工学

科研費の分科・細目：電気電子工学・電子電気材料工学

キーワード：作製・評価技術、量子化学計算、表面、

## 1. 研究計画の概要

ULSI デバイスの微細化は高性能化・低コスト化ができるためであり、これが崩れてしまうと微細化のモチベーションが失われる。そこで、本申請では ULSI の性能に大きな影響を及ぼす移動度が Si よりも高い Ge を使ったデバイスを作製するために必要となる表面処理方法について調べ実用化に向けた検討を行うことを目的とする。

(1) 量子化学計算のための Ge 基板モデルの構築：量子化学計算を行うためには、対象となる Ge のモデルを構築する必要がある。モデルは結晶の一部を切り出し平面方向に周期境界条件を課して疑似的に無限に広がったものとする。

(2) Ge 基板モデルを用いた表面終端原子の検討：Ge クラスタ表面に色々な原子を反応させ安定構造を計算する。また、これらの修飾された表面と酸素との反応性について調べ表面を不活性化できるものについて探索を行う

(3) 表面修飾 Ge の作製：実際に求めた構造を実際に作製する方法について調べる。溶液処理または気相処理により実現できないか理論的に調べる。他にも、熱的に拡散させる、ラジカルなど活性種を使うなど、実用化を考えてできるだけ広く用いられている方法を研究室で実施使用可能な装置を活用して研究を進めていく。

(4) 表面修飾の実験的検証：実際に Ge 基板に対し表面処理を行い、どのような表面になっているかを XPS や AFM などにより調べる。実験結果と計算結果を対比しながらより正確に表面修飾について検討を行う。

(5) High-k/Ge 界面の作製：MOCVD や溶液法などを用いて Ge 基板等の上に high-k 薄

膜の作製を行う。作製された薄膜は所属する研究室で使用可能な各種評価装置(I-V、C-V、FT-IR、XPS、AFM、ESR など)を活用し、その基本的特性を確認する。

(6) High-k/Ge 界面の未結合手の不活性化：分子軌道計算などにより界面の不活性化を行うために有効な元素もしくは構造について検討する。

(7) High-k/Ge 界面特性改善：計算で求めた知見を用い実際に high-k/Ge 構造を作製し、界面の不活性化の実験を行う。界面状態については C-V や DLTS などについて評価を行う。

## 2. 研究の進捗状況

(1) 量子化学計算を行うためには、対象となる Ge のモデルを構築する必要がある。計算精度を上げるためにはできるだけ大きなクラスタが必要であるが、多くの構造を計算するため 1 日程度で計算を終了できるサイズを目安とし Ge 原子 100 個程度からなるクラスタを構築した。また計算のモデルに合わせて 2 次元の周期境界条件を設定した。

(2) Ge クラスタ表面に網羅的に多種の原子を反応させ安定構造を計算した。この結果、Si と異なり Ge 表面は H により安定化できず、F は表面の Ge 原子との結合が非常に強く、さらに、C や B も比較的表面を安定化することがわかった。これらの結果より、F 表面処理は非常に有効であることが分かった。また、B による安定化の可能性も示せた。

(3) そこで、次に溶液処理などにより F や B 表面修飾が出来ないか調べた。しかし、B を含む溶液でエッチングしても、表面に B を吸着させることが出来なかった。溶液処理をさらに進めるために、ハロゲン族についてそ

の結合を調べた。その結果 F が最も強く、界面準位の低減化に有効であると考えられるが、Cl も H より結合が強く界面準位低減の可能性が計算から分かった。

(5) 電子親和力は Cl が F よりも大きいため、溶液処理による表面修飾の可能性が考えられたため、Ge 表面を HCl に浸漬することで表面処理をおこないその後光 MOCVD により HfO<sub>2</sub> 薄膜を堆積し界面状態を調べた。その結果、界面準位が処理をしていないものよりも小さくなり、さらにリーク電流も低減することが分かり、簡便な溶液処理により界面特性を向上させることが出来た。

### 3. 現在までの達成度

おおむね順調に進展している。

(理由)

ほぼ、予定通り Ge 表面状態の計算を完了し、さらに表面終端元素の計算、ガスおよび溶液による実験的検証等も進んでいるため上記のように判断した。

### 4. 今後の研究の推進方策

最終年度は研究計画に従い(6)(7)の High-k/Ge 界面状態の評価および特性改善に注力し、デバイス性能向上のための指針を出すことを計画している。

### 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3件)

D. Lee, H. Lee, T. Kanashima and M. Okuyama, "Theoretical Analysis of Fluorine-Passivated Germanium Surface for High-k/Ge Gate Stack by Molecular Orbital Method", Appl. Surf. Sci. 257 (2010) 917-920. 査読あり

T. Kanashima, H. Lee, Y. Mori, H. Imajo and M. Okuyama, "Fixed-Oxide-Charge Characterization by Photoreflectance Spectroscopy in HfO<sub>2</sub> on Ge Treated by Fluorine", Proceedings of ECS Transactions (PRiME2008), (Volume 16, Issue 10, 2008) p. 699-705. 査読あり

H. Lee, T. Kanashima and M. Okuyama, "Preparation and Characterization of Hafnium Silicate Dielectric Layers by Photo-Assisted MOCVD Using Mixed Precursor of Hf(O-t-C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>)<sub>4</sub> and Si(O-t-C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>)<sub>4</sub>", Integrated Ferroelectrics 97 (2008) 103-110. 査読あり

[学会発表](計12件)

T. Kanashima, Y. Yoshioka, D. Lee and M.

Okuyama, "Characterization of Interface States of HfO<sub>2</sub>/Ge with Fluorine Treatment by Using DLTS/ICTS", 218th ECS Meeting, (Las Vegas, NV, 2010, October 10-15) p. 1879.

D. Lee, H. Imajo, T. Kanashima and M. Okuyama, Improvement of The Property of FET Having The HfO<sub>2</sub>/Ge Structure Fabricated by Photo-Assisted MOCVD with Fluorine Treatment, 2010 International Conference on SOLID STATE DEVICES AND MATERIALS, (Tokyo, Japan, 2010, September 22-24) P-1-12.

D.H. Lee, H. Lee, H. Imajo, Y. Yoshioka, T. Kanashima and M. Okuyama, "Post nitridation of fluorinated HfO<sub>2</sub>/Ge gate stack by nitrogen radical treatment", The 8th Japan-Korea Conference on Ferroelectrics (JKC-FE08), (Himeji, Japan, 2010, August 3-6) P1-026.

T. Kanashima, H. Lee, Y. Mori, H. Imajo and M. Okuyama, "Fixed-Oxide-Charge Characterization by Photoreflectance Spectroscopy in HfO<sub>2</sub> on Ge Treated by Fluorine", Pacific Rim Meeting on Electrochemical and Solid-State Science, PRiME2008, (Honolulu, 2008, October 12-17) p. 2451.

H. Lee, D.H. Lee, T. Kanashima and M. Okuyama, "Theoretical analysis of fluorine-passivated germanium surface for high-k/Ge gate stack by molecular orbital method", The 7th Korea-Japan Conference on Ferroelectricity (KJC-FE07), (Jeju, Korea, 2008, August 06-09) P-08-27.