

令和 5 年 5 月 26 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究

研究期間：2019～2022

課題番号：19K15050

研究課題名（和文）半導体表面/界面における特異な電子フォノン散乱の起源の解明

研究課題名（英文）Analysis of enhanced electron-phonon scattering at semiconductor surface/interface

研究代表者

田中 貴久（Tanaka, Takahisa）

東京大学・大学院工学系研究科（工学部）・助教

研究者番号：30782081

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：バルクでは観測されない表面/界面で生じるキャリア散乱の変調を理解するため、計算によるナノワイヤやナノシートのキャリア輸送再現と、実験との比較を行った。分子動力学法と量子輸送計算の組み合わせによるキャリア輸送の計算から、電子フォノン散乱の効果を低い計算負荷で考慮することに成功した。そして、実験的な半導体ナノワイヤや金属ナノシートに近いスケールのキャリア輸送の再現に成功し、キャリア散乱の変調を解析した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究で得られた表面/界面におけるキャリア散乱の理解は、今後の集積回路内のトランジスタや配線の設計・材料選択において、表面/界面のエンジニアリングによる電気特性の制御を実現するために重要である。また、本研究で実施した計算手法は低い計算負荷で現実的なキャリア輸送を再現できることから、集積回路に限らず様々なデバイスの特性を予測し、材料の最適化を行う際に適用可能である。

研究成果の概要（英文）：In order to understand the modulation of carrier scattering at surfaces/interfaces, which is not observed in bulk materials, carrier transport in nanowires and nanosheets is computationally reproduced and compared with experiments. The carrier transport was calculated by a combination of molecular dynamics and quantum transport calculations, and the effect of electron-phonon scattering was successfully taken into account with a low computational burden. As a result, we succeeded in reproducing the carrier transport on a scale similar to that of realistic semiconductor nanowires and metallic nanosheets, and analyzed the modulation of carrier scattering.

研究分野：電子デバイス

キーワード：ナノワイヤ ナノシート キャリア散乱 フォノン 移動度

1. 研究開始当初の背景

最先端の集積回路を実現するには、Technology CAD によって電気特性を正確に再現できることが必要である。電気特性の再現において、フォノンによる電子散乱は室温以上のトランジスタや配線内のキャリア輸送に大きく影響を与える重要な現象である。トランジスタでは、電子フォノン散乱は格子のひずみによるエネルギーバンド変調の実効的な値である変形ポテンシャルを用いて記述されてきた。従来、変形ポテンシャルはバルク半導体と同じ値であると考えられてきた。しかし、最先端のトランジスタとして重要な微細なシリコン(Si)ナノ構造では、Si/SiO₂界面で変形ポテンシャルが変調されていることが実験的に示唆された。そのため、界面における電子フォノン散乱を正確にモデリングすることが最先端の集積回路で重要となる。電子フォノン散乱のモデリングには密度汎関数摂動論を用いることが一般的だが、アモルファスと結晶の界面を正確に取り扱うのは計算負荷の面から困難であった。

2. 研究の目的

本研究では、ナノスケールの様々な界面における電子フォノン散乱の特異性の起源を、ナノシート材料での実験と原子スケールの計算とを融合することで解明することを目的とする。得られた知見はあらゆるナノ電子材料に応用することが可能であり、今後の情報通信技術の発展につながるだけでなく、ナノ材料の物性(ピエゾ効果等)を理解する学術基盤にもなる。

3. 研究の方法

本研究では、Si やゲルマニウム(Ge)などの半導体ナノワイヤや白金(Pt)ナノシートなどナノ構造の表面・界面を分子動力学法により再現した。分子動力学法から得られた原子位置のスナップショットに基づき、ナノ構造中の透過係数を量子輸送計算で求めた。

従来までの研究で強結合近似のパラメータが多数報告されてきた Si については強結合近似に基づく非平衡グリーン関数法を用い、バンド構造が複雑で強結合近似が一般的でない Pt については第一原理計算に基づく非平衡グリーン関数法を用いた。透過係数はスナップショット毎の原子位置に強く依存するため、複数のスナップショットから得られる透過係数の平均値を用いることで、実効的な透過係数を求めた。透過係数から得られる電気抵抗の輸送方向長さ依存性から電気抵抗率を求めた。

得られた電気抵抗率は、様々な原子変位による散乱の効果が取り入れられているため、密度汎関数摂動論よりも大幅に高速な計算が実現できる。そこで、半導体では電気抵抗率から求めた移動度を実験値と比較し、金属については鏡面性パラメータを用いることでキャリア輸送を解析した。

4. 研究成果

(1)酸化膜で覆われた半導体ナノワイヤ中の移動度計算

Si/SiO₂界面において、電子フォノン散乱の強度に関連する変形ポテンシャルの値については、実験的な電子移動度の再現のためにバルク Si よりも大きな値が経験的に用いられてきた。一方で、変形ポテンシャルを増大させているメカニズムについては十分に解析されていなかった。今後の最先端のトランジスタは、ナノワイヤやゲートオールアラウンド型になると考えられ、表面/界面での変形ポテンシャル変調はますます重要となる。

そこで本研究では、Si/O に関する Tersoff ポテンシャルを用いて酸化膜で覆われた Si ナノワイヤを作成した(図1)。得られた Si ナノワイヤの原子位置に基づき、sp³d⁵s^{*}強結合近似に基づいて Si ナノワイヤのハミルトニアンを構成した。この時、SiO₂を含めると電荷によるクーロン散乱などが影響すると予想されるため、SiO₂部分を除き、最表面の Si の未結合手は水素終端した。これにより電子フォノン散乱の寄与のみを評価できると考えられる。

次に、ナノワイヤ両端の半無限電極を自己エネルギーの形で考慮し、非平衡グリーン関数法からナノワイヤ両端間の透過係数を再帰的に計算した。分子動力学法で用いる乱数シードに依存して原子位置のスナップショットが変化し、結果として透過係数も変化する。そこで、異なる乱数シードを用いて SiO₂で覆われた Si ナノワイヤを 100 回作成し、それぞれのスナップショットから透過係数を計算して平均した。

ナノワイヤ内の 3 次元的なキャリア濃度が $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ になるようにフェルミエネルギーを決定し、ナノワイヤの電気抵抗を計算した。ナノワイヤの長さを変えて電気抵抗を計算することで、長さ依存性から電気抵抗率を導出できる。さらに、電気抵抗率とキャリア濃度から半導体内のキャリア輸送を記述する際に重要なパラメータである移動度を求めた(図2)。清浄表面を持つ Si

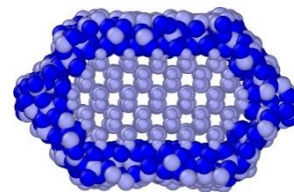


図1. SiO₂で覆われた Si ナノワイヤの断面。灰色と青色の球はそれぞれ Si と酸素原子を示す。SiO₂部分は 2000 K でアニール後、1 K/ps で冷却してアモルファス構造を作成した。

ナノワイヤ内の移動度は先行研究の計算値を再現し， SiO_2 で覆われたナノワイヤは先行研究の実験値を再現しており，本研究の手法で酸化膜由来の変形ポテンシャル増大を考慮できていると考えられる．Silicon-on-insulator に代表されるナノシート構造でも計算を実施しており，測定した移動度をおおむね再現する結果が得られている．

そして，変形ポテンシャル増大の要因としては，スナップショットから界面において Si の原子位置が平衡位置からずれた状態で振動していることが原因であると推察される(図3)．一方で，Ge ナノワイヤに関する計算では GeO_2 の被覆による大きな移動度の劣化は観測されなかった．これらの成果から，酸化膜と半導体を選択する際に半導体表面の原子位置の変化が小さい酸化膜を用いれば，電子フォノン相互作用の増大を抑制できると考えられる．

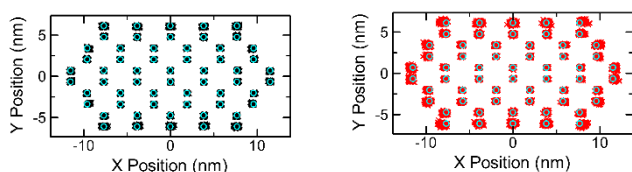


図3. 水素終端 Si ナノワイヤ(左図)と SiO_2 被覆 Si ナノワイヤ(右図)中の複数スナップショットにおける原子位置． は平衡状態における Si の原子位置．

(2) ナノシート表面の吸着物に依存した電気抵抗率計算

本研究を進める過程で，Si ナノシートトランジスタ上の分子膜が電気特性に与える影響の解析を経て，分子動力学計算に基づく原子位置を利用し，様々な材料からなるデバイスの電気特性解析が可能であるとの着想を得た．一例として，本研究の手法を適用可能な金属ナノ構造では，集積回路の配線における電気抵抗率や，ガスセンサの応答のモデリングが重要とされている．

従来，金属ナノ構造の電子散乱では，表面/界面に到達した電子が鏡面的に反射される確率に相当する鏡面性パラメータが用いられてきた．しかし，多くの場合で鏡面性パラメータは実験値から経験的に決定されてきており，事前に予測することが困難であった．

本研究では，半導体ナノワイヤに用いた手法をナノシートに適用して計算を実施した(図4)．様々な表面について考慮するため，清浄，水素被覆，酸素被覆表面を持つ Pt(111)面ナノシートと，バルク Pt について計算を行った．

水素被覆や酸素被覆は Pt 表面における触媒作用の結果生じる．分子動力学法で化学反応を再現するためには，化学結合の生成と開裂を表現できる反応力場などが使用可能である．そこで本研究では，反応力場に基づいて分子動力学法とグランドカノニカルモンテカルロ(GCMC)法を交互に実施した．GCMC 法では仮想的なガスリザーバーを仮定し，乱数により分子動力学法シミュレーションセル内に原子の追加と削除を行う．水素と酸素のそれぞれについてガスリザーバーを仮定し，300 K における水素被覆表面と酸素被覆表面を再現した．通常の分子動力学法のシミュレーションでは，タイムステップ幅がピコ秒やフェムト秒単位であり，実験的に秒～分単位の時間を要する化学反応を再現することは困難である．一方，GCMC 法ではエネルギー的に安定な位置に既に開裂した水素原子または酸素原子を付加・削除するため，タイムステップ幅によらずに化学反応の結果生じる表面を再現可能である．分子動力学法と GCMC 法の組み合わせは触媒反応を再現する際にはしばしば用いられるが，量子輸送計算と組み合わせた研究については本研究が世界初である．

得られた様々な表面やバルクの原子位置のスナップショットに対して，半導体ナノワイヤと

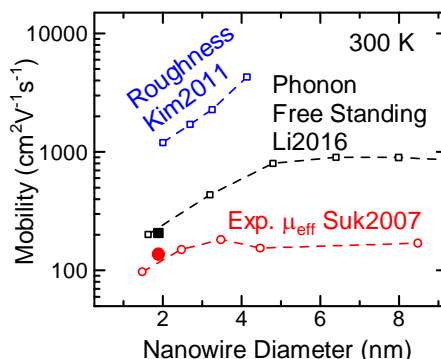


図2. 電子移動度の実効的なナノワイヤ直径依存性．塗りつぶしたシンボルは本研究で得られた結果．白抜きシンボルは先行研究(S. Kim *et al.*, IEEE Trans. Electron Devices **58**, 1371 (2011)., J. Li *et al.*, J. Appl. Phys. **120**, 1371 (2016)., S. D. Suk *et al.*, IEDM (2007).)より引用．

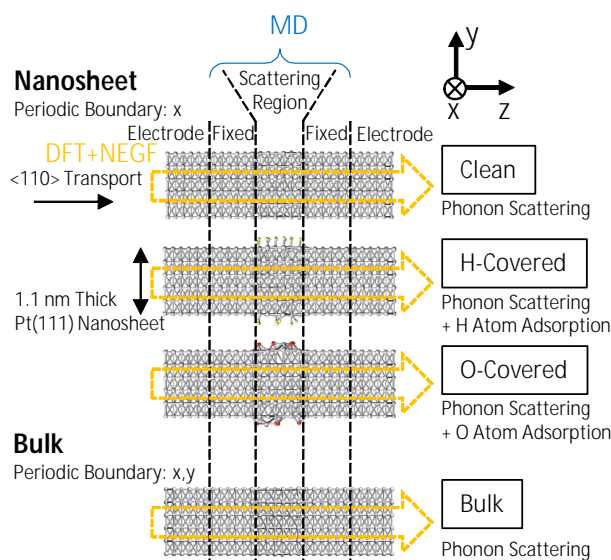


図4. Pt ナノシートにおける計算の概念図．分子動力学法による計算後に量子輸送計算を実施する(雑誌論文1)．

同様に量子輸送計算を実施した。Pt については汎用的に使用可能な強結合近似パラメータが存在しないため、第一原理計算に基づいた非平衡グリーン関数法を用いた。そのため、金属ナノシートの計算では半導体ナノワイヤの場合と異なり、電子フォノン散乱の変調と吸着物によるクーロン散乱が同時に考慮されている。

原子位置のスナップショットに基づいて電気抵抗率を求めて、ナノシートの抵抗の長さ依存性から電気抵抗率を求めることができる(図 5)。ナノシートの電気抵抗率は Fuchs-Sondheimer の式より、バルクの電気抵抗率、膜厚、平均自由行程と鏡面性パラメータで記述できる。そのため、本研究で求めた電気抵抗率を用いれば鏡面性パラメータを導出できる。バルクの電気抵抗率と膜厚は既知のため、平均自由行程をフェルミエネルギー近傍のバンド構造の勾配から計算した(図 6)。得られた平均自由行程を用いることで酸素と水素被覆時の鏡面性パラメータを導出した。本成果は、金属ナノ構造の電気抵抗率を変調させる鏡面性パラメータを半経験的に高速な計算から求められることを示している。様々な材料に対して本手法を適用することで、集積回路に最適な配線材料や高感度なガスセンサの材料をハイスループットに求められる可能性がある。

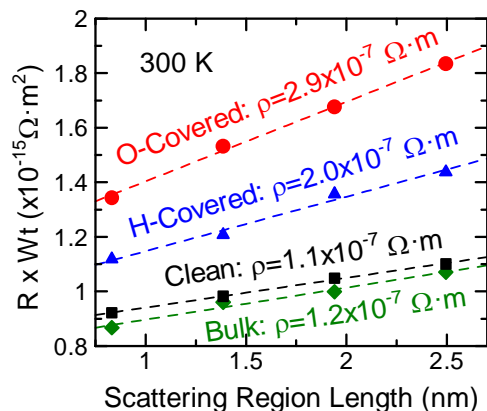


図 5. 様々な表面におけるナノシートの電気抵抗 R 、幅 W と膜厚 t の積の長さ依存性。直線の傾きが電気抵抗率に相当(雑誌論文 1)。

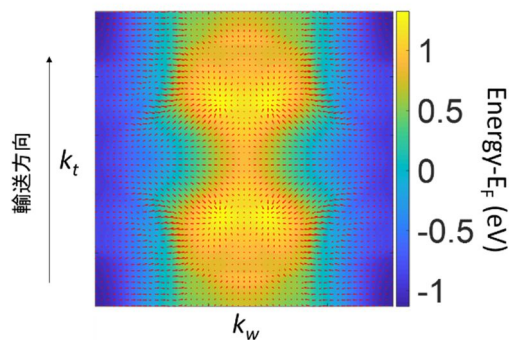


図 6. フェルミエネルギー近傍の Pt(111) ナノシートのバンドのカラープロット。赤矢印はバンドの勾配。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 T. Tanaka, T. Kato, T. Yajima, K. Uchida	4. 巻 42
2. 論文標題 Atomistic simulation study of impacts of surface carrier scatterings on carrier transport in Pt nanosheets	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 IEEE Electron Device Letters	6. 最初と最後の頁 1057 ~ 1060
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1109/led.2021.3077466	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 T. Tanaka, T. Yajima, K. Uchida	4. 巻 59
2. 論文標題 Impact of defects in self-assembled monolayer on humidity sensing by molecular functionalized transistors	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 S11E04
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.35848/1347-4065/ab80dc	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計6件（うち招待講演 1件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 T. Tanaka, K. Uchida
2. 発表標題 Enhanced electron phonon scattering in Si nanowires covered by oxide
3. 学会等名 240th ECS Meeting（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中 貴久, 内田 建
2. 発表標題 酸素吸着によるPt薄膜抵抗率変化の原子論的解析
3. 学会等名 第68回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中貴久, 矢嶋赳彬, 内田建
2. 発表標題 原子スケールでSiO ₂ /Si界面の電子フォノン散乱を考慮したSiナノワイヤ中の移動度計算
3. 学会等名 第81回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 田中貴久, 内田建
2. 発表標題 酸素吸着によるPt薄膜抵抗率変化の原子論的解析
3. 学会等名 第68回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 T. Tanaka, T. Yajima, K. Uchida
2. 発表標題 Atomistic Study of Sensing Mechanisms of Molecular Decorated FETs
3. 学会等名 32nd International Microprocesses and Nanotechnology Conference (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田中 貴久, 矢嶋 赳彬, 内田 建
2. 発表標題 分子修飾トランジスタガスセンサにおける修飾分子と標的ガス分子との相互作用の研究
3. 学会等名 第67回 応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2020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
--	---------------------------	-----------------------	----

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