



千葉大学
Chiba University



東京工業大学
Tokyo Institute of Technology



名古屋大学



Si ナノデバイスのための画期的な電極形成法を学独連携で実現

—Si 基板への不純物添加を伴わない画期的な電極形成法を発見—

平成22年12月9日

独立行政法人物質・材料研究機構

国立大学法人千葉大学

国立大学法人東京工業大学

国立大学法人名古屋大学

国立大学法人筑波大学

概要

1. 独立行政法人物質・材料研究機構（理事長：潮田資勝）半導体材料センター（センター長：知京豊裕）は、千葉大学、東京工業大学、名古屋大学、筑波大学、早稲田大学、JST-CREST と共同で将来のナノデバイス実現のための新しい電極形成法を開発した。
2. 今回の開発はSi 側には手を加えず、金属側のみ不純物を添加することで、金属/Si 界面のショットキー障壁高さを制御できることを千葉大学が理論的に予測し、それを物質・材料研究機構、東京工業大学、名古屋大学、筑波大学、早稲田大学、JST-CREST が連携する実験で実証したもので、これまでにない全く新しい電極形成法である。
3. Si 半導体では、接触抵抗値の低い電極/Si 接合を実現するために、Si 側に不純物を添加することで良好な金属/Si 接合を実現してきた。
4. しかし、デバイスの微細化とともに、Si 側に添加する不純物の位置のばらつきや濃度のばらつきが金属/Si 界面に影響しはじめ、安定した電極構造が実現できなくなっていた。
5. 今後、Si デバイスの接合領域はますます微細化し、構造も Si 細線を使ったデバイスなど三次元化していく傾向にある。しかし、これまでは安定した電極を形成する手段がなく、接触抵抗も大きいなど課題を抱えていた。今回の成果はこれまでの課題を解決する画期的な方法である。
6. 集積回路や将来のナノデバイスではナノ空間における材料の生成過程やその性質を根本的な仕組みから理解することが本質的な問題解決につながる。今回の成果は、様々な専門性を持つ多くの研究者、研究機関が携わることではじめて実証できた成果である。
7. 今回の研究成果は、日本時間12月8日（水）午後16時45分（サンフランシスコ現地時間12月7日午前10時45分）に、International Electron Device Meeting (IEDM) 2010 で発表されました。

研究の背景

集積回路の基本構造である電界効果トランジスタ (MOSFET) は、図 1 (a)に示すように、電子が流れる Si の「チャンネル」、電子を送り出す「ソース」電極、電子を受け取る「ドレイン」電極、電子の流れを On/Off する「ゲート」電極から構成されている。この MOSFET は微細化すればするほど性能が上がる性質がある。実際、現在の最先端の集積回路ではわずか「ソース」と「ドレイン」の距離は 16nm 程度の大きさしかない。しかし、将来さらに微細化していくためには多くの問題が出てくる。その一つが、電極材料の問題である。

ソース電極からチャンネルに電子を送り出す金属/半導体界面には、ショットキーバリアという、電子の送り出しを邪魔する障壁がある。この障壁を小さくすることができれば、消費電力や発熱を小さくすることができ、携帯電話や PC 等の電子機器におけるエネルギー消費が画期的に改善される。従来は、電極材料として Si チャンネルと接触が非常に良いシリサイドが使われ、図 1 (b)のようにソース電極とチャンネルの間に不純物を入れることで障壁を小さくする工夫（偏析技術など）が行われていた。しかし、不純物は、いったん Si チャンネル内部に侵入すると、電子の流れを邪魔する弊害にもなるため、将来のより微細化した MOSFET には使うことができない。そのために、ショットキー障壁を小さくする新しい指針が待ち望まれていた。

研究成果の内容

今回、上記した電極の問題を解決するために、最先端の計算科学（第一原理計算）を用いて、電子レベルで、図 1 (c)のように、シリサイドの中だけに不純物を混ぜてショットキー障壁を小さくできることが明らかになった。つまり、障壁を小さくする仕組みや、どんな不純物を用いればよいか、どうすれば不純物は混ざりやすいのか、に対する新しい原理を世界で初めて明らかにし、それが実験的にも証明された。

従来、シリサイドに不純物を混ぜると、ショットキー障壁を左右するフェルミレベルがどのように変化するか、どのような不純物を混ぜると障壁が小さくなるか、どうすれば不純物が入りやすいかに対する指針はなく、試行錯誤的に不純物が混ぜられていた。しかし、今回の計算結果から、まず、Si と金属原子が化合したシリサイドの中では、一部の電子が Si から金属原子に移動しているというこれまで知られていなかった画期的となる仕組みが明らかになった。さらにこの仕組みに基づくと、図 2 に示すように、不純物の価電子数が Si より大きいとフェルミレベルは上昇し、Si より小さいとフェルミレベルが下降すること、前者の上昇を起こす不純物ほどシリサイドに混ざりやすいこと、これらの特性はシリサイドが自然界で安定に存在できるという基本的な性質と関係している等の将来の電極を設計する上で普遍的な性質が明らかになった。

これにより、将来のナノスケールデバイスの電極材料を制御する新しい原理が確立されたことになり、この後のデバイス開発は見通しの良いものとなり数段加速され、日本の半導体産業に大きく貢献すると期待される。

今回、千葉大学と物質・材料研究機構、筑波大学で得られたこの新原理に基づく理論予測は、東京工業大学、名古屋大学、早稲田大学が共同で行った実験により実証され、本研究成果となった。現在の先端デバイス開発においては、このように多方面で様々な専門性を持つ多くの研

究者が、いわば All Japan として携わることで、総合的に、強力かつ迅速に研究を行うことが不可欠になっている。今回の成果はこうした連携の重要性を示した実証例となった。

波及効果と今後の展開

集積回路や将来のナノテクノロジーにおいては、ナノメートルスケールの空間における材料の生成過程やその性質を根本的な仕組みから理解することが急務かつ最重要となっている。本研究で得られた結果は、ナノ空間での材料の新たな可能性を広げる普遍的な知見であり、Si 以外の先端 Ge 材料や化合物半導体材料の電極問題、さらにバイオテクノロジー分野における電極など、将来のエレクトロニクスに対し大きな指針を与えるものである。

本成果は、2010 IEEE International Electron Devices Meeting (2010.12.6-8, San Francisco)において、「Theory of Workfunction Control of Silicides by Doping for Future Si-Nano-Devices based on Fundamental Physics of Why Silicides Exist in Nature」(シリサイドは何故自然界に存在できるかという基礎物理に基づく将来の Si ナノデバイスの仕事関数制御の理論)という題名で、7日の午前10時45分から千葉大・中山により発表される。

本成果は、独立行政法人科学技術振興機構 (JST) と独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) の委託業務の結果得られたものである。尚、本成果のうち千葉大学、筑波大学、NIMSはシリサイドの理論検討を担当、東京工業大学、名古屋大学、早稲田大学は実験による実証を担当した。

【用語解説】

チャンネル：

電子デバイスにおいて電子が流れて機能を発現する最も重要な部分。電子の量（電流）の大きさが On/Off で大きく変化することにより機能を引き出す。将来の極微細デバイスにおいては、この部分に不純物が混入すると、特性の制御が難しくなると考えられている。

ショットキーバリア（障壁）：

電極からチャンネルに電子を送り出すときに、電極／チャンネル界面において電子が感じるエネルギー障壁のこと。この障壁が低いほど電子の送り出しはスムーズになり、電子デバイスの発熱量が小さくなるため。そのために、発熱が逃げにくい将来の極微細デバイスにおいては、障壁の制御は不可欠と考えられている。

シリサイド：

シリコン（Si）と金属原子から作られた金属化合物。代表例は、Si とニッケル（Ni）から作られたニッケルシリサイド（ Ni_xSi_y ）である。チャンネルをつくる Si と歪が小さく接触でき、高温度でも安定なため、Si チャンネルにとって理想的な金属電極材料と考えられている。しかし今まで、その性質を基本原理から調べた例は少なかった。今回、シリサイド電極内の電子に関する普遍的性質が解明されたため、電極材料の開発が進展すると期待される。

第一原理計算：

物理学の基本法則に基づき、物質の性質を電子レベルから理論的に調べることができる数値計算法。最近では、大型のスーパーコンピュータを駆使することにより、材料やその機能の特性の重要な部分を解明することができるようになり、材料開発には欠かせない手法となりつつある。

フェルミレベル：

金属電極中の電子が持つ最も高いエネルギー値。このエネルギーを持つ電子が、電極から Si チャンネルに送り出されて、機能を発現する。

価電子数：

全ての原子は、その原子核にへばりついて原子から離れない内殻電子と、原子の外側を回って原子間を飛びうるあう価電子(valence electron)を持つ。原子が持つ後者の電子数を、価電子数という。原子の周期律表は、この価電子数に基づき分類されている。

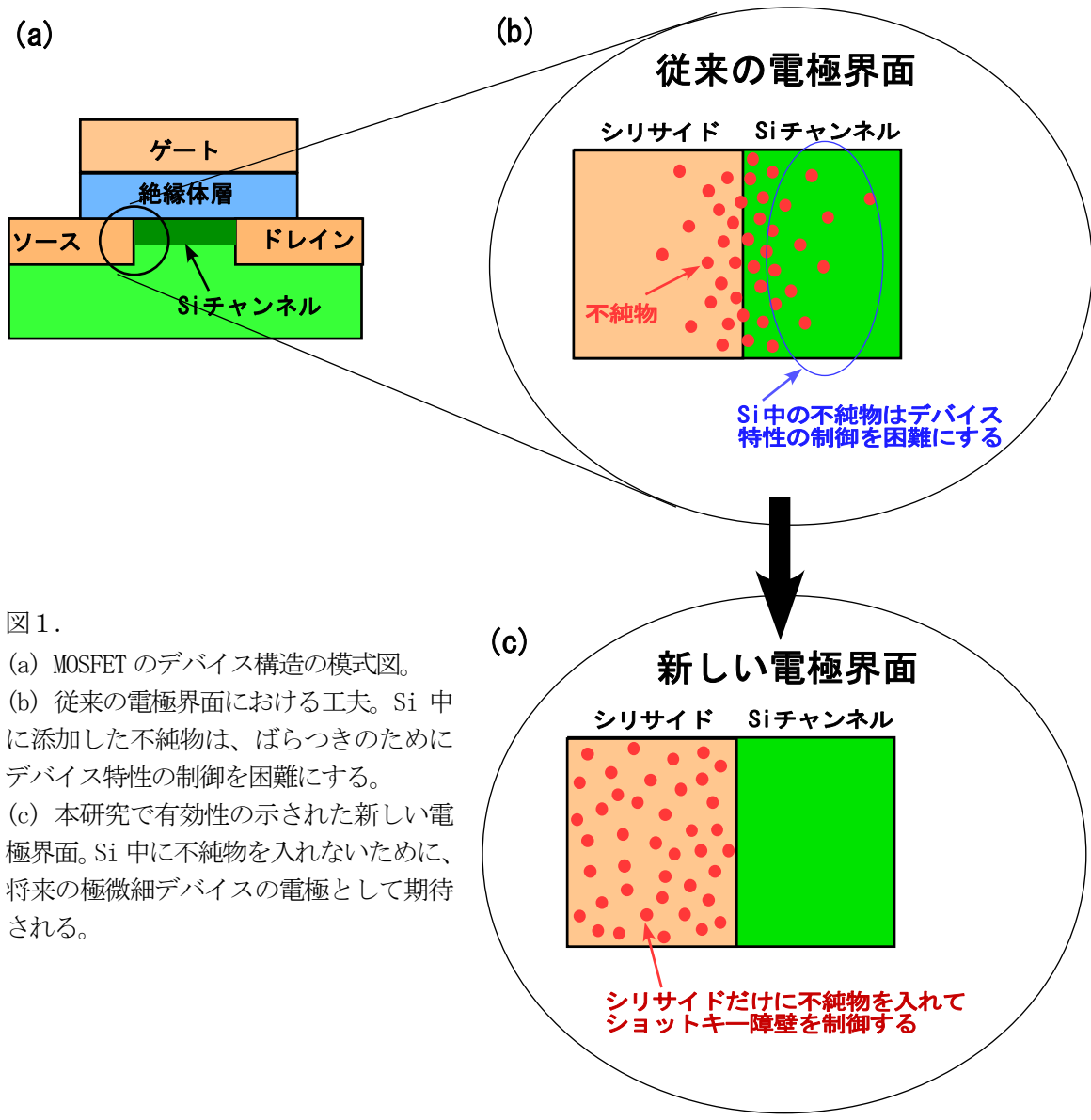


図1.
 (a) MOSFETのデバイス構造の模式図。
 (b) 従来の電極界面における工夫。Si中に添加した不純物は、ばらつきのためにデバイス特性の制御を困難にする。
 (c) 本研究で有効性の示された新しい電極界面。Si中に不純物を入れないために、将来の極微細デバイスの電極として期待される。

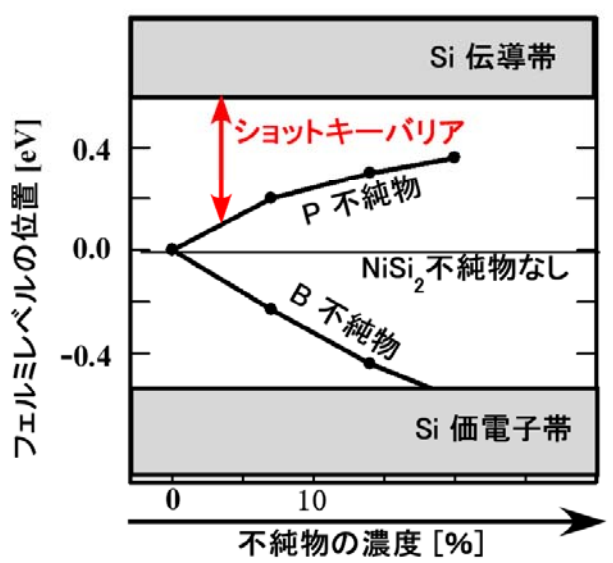


図2. ニッケルシリサイドの不純物を入れた場合のフェルミレベルの変化。本研究により、PやAs、S等の不純物を入れると伝導帯のショットキー障壁が小さくなり、BやMg不純物を入れると価電子帯のショットキー障壁が小さくなることが明らかにされた。その効果は不純物濃度が高くなるほど顕著になる。