



応用物理学会分科会

シリコンテクノロジー

No. 101 9th & 10th June, 2008

共催: 電子情報通信学会 シリコン材料・デバイス研究会 (SDM)

「ゲートスタック構造の新展開」特集号

目次

<u>ゲートスタック構造の新展開: 高移動度チャネル技術を中心に</u> 巻頭言 藤岡洋 (東京大学) 野平博司 (武蔵工業大学)	1
<u>ゲートスタック構造の新展開-チュートリアル講演</u> 高性能 CMOS のための高移動度チャネル技術の現状と展望 高木信一 (東京大学)	2
化合物半導体電子デバイス開発の軌跡 大野泰夫 (徳島大学)	8
<u>ゲートスタック構造の新展開 (I)</u> Si 反転層中のホールサブバンド分散 武田さくら・森田誠・大杉拓也・谷川洋平・大門寛 (奈良先端科学技術大学院 大学)	14
MOS 反転層モビリティの高精度評価 鳥海明・喜多浩之 (東京大学)	18
シリコン(110)面 pMOSFET における反転層容量と低電界移動度特性 齋藤真澄・小林茂樹・内田 建 ((株) 東芝)	24
極薄膜 SOI トランジスタにおける量子効果による移動度向上 平本俊郎・清水健・筒井元 (東京大学 生産技術研究所)	29
<u>ゲートスタック構造の新展開 (II)</u> 歪 Si ナノワイヤトランジスタにおけるトランスコンダクタンスエンハンスメント 清家綾・丹下智之・佐野一拓・杉浦裕樹・土田育新・太田洋道・渡邊孝信 (早稲田大学)、小瀬村大亮・小椋厚志 (明治大学)、大泊巖 (早稲田大学)	35
III-V チャネル MISFET 実現に向けたゲート絶縁膜界面制御技術 安田哲二・宮田典幸 (産総研)・大竹晃浩 (物材機構)	40

裏表紙に続く

Si反転層中のホールサブバンド分散

武田さくら[†] 森田 誠[†] 大杉 拓也[†] 谷川 洋平[†] 大門 寛[†][†] 奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科

〒 680-0192 奈良県生駒市高山町 8916-5

E-mail: †sakura@ms.naist.jp

あらまし CMOS channel 中の電子やホールの有効質量の軽量化は情報処理速度向上のための有力な手段である。電子やホールの有効質量はバンド分散構造を測定することで直接求めることが出来る。そこで我々は極微細 CMOS 中の p-channel と同等のシリコン反転層を Si(111) 面に作製し、反転層中に量子化によって形成されるサブバンドの分散構造を角度分解光電子分光法を用いて測定している。本講演では測定の詳細と主な測定結果について報告する。サブバンドの分散構造や方位依存性は基本的にバルク Si のバンドと一致すること、つまり有効質量の性質は量子化されても変化しないことがわかった。また、表面ポテンシャルを変えるとサブバンドエネルギー位置は変わるが分散構造は基本的に変化しないことがわかった。

キーワード シリコン 反転層 サブバンド分散 有効質量

Hole Subband Dispersions in Si Inversion Layers

Sakura NISHINO TAKEDA[†], Makoto MORITA[†], Takuya OHSUGI[†], Yohei TANIGAWA[†], andHiroshi DAIMON[†][†] Graduate School of Materials Science, Nara Institute of Science and Technology

Takayama-cho, 8916-5 Ikoma-shi, Nara, 630-0192, Japan

E-mail: †sakura@ms.naist.jp

Abstract Subband dispersion quantized in Si inversion layer was measured by Angle-resolved photoemission spectroscopy. The dispersion structure and its in-plane anisotropy was found to be basically same as the bulk Si. This means that the effective mass is not changed by the quantization.

Key words Silicon, Inversion layer, subband dispersion, effective mass

1. はじめに

CMOS の微細化が進んだ近年、更なる微細化による情報処理速度の向上を望むことが難しくなり、代替手段の開発が急務となっている。結晶中の電子やホールの運動する速度は主にそれらの有効質量と散乱効果で決まる。そこで、チャンネル中の電子やホールの有効質量を軽くし、速度を向上させようという研究が進められている。

有効質量は、電子やホールが結晶中を進むときにどのようにポテンシャルを感じるかで決まるものである。このため、結晶中の方向毎に固有の有効質量が存在する。例えばシリコン結晶の重いホールの場合、(100) 面内では [011] 方向と比べ、[001] 方向の有効質量は半分以下であり、(111) 面内では、[1 $\bar{1}$ 0] 方向よりも [112] 方向のほうが有効質量が小さい。この有効質量はバンド分散曲線を波数で 2 回微分することで求める。

チャンネルの方向を有効質量の小さい方向へ合わせることで、チャンネル中のキャリア速度はより大きくなることが期待される。シリコンバルクの有効質量は、1950 年代にサイクロトロン共鳴で得られる面内有効質量を平均化した有効質量、いわゆるサイクロトロン有効質量の測定で求められた [1]。また、 $k \cdot p$ 法のバンドパラメータは各面の有効質量の実測値を再現できるように決定された [1], [2]。

現実には、極微細 CMOS 構造ではチャンネルとなる反転層の深さ (酸化膜/Si チャンネル界面から Si 基板内部への電場侵入長) は数 nm 程度となる。そのため、チャンネル中の電子状態は Si バルク結晶の電子状態と同じではなく、反転層深さ方向に量子化された電子状態、いわゆるサブバンドとなる [9]~[11]。そのため、このサブバンドの有効質量を測定する必要がある。シリコンサブバンドの有効質量 (サイクロトロン有効質量) は 1970 年代にシュブニコフドハース振動 [5]、サイクロトロン共鳴 [6]

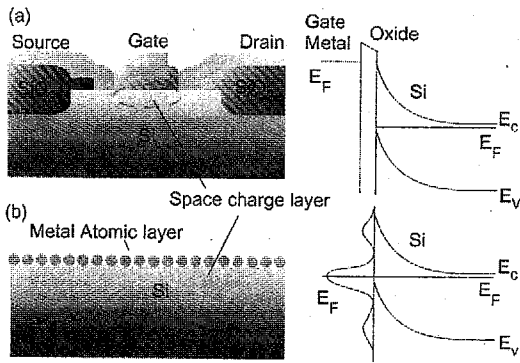


図1 The surface band bending induced by (a) MOS structure and (b) a metal atomic layer. The right hand sides are the corresponding band bending profiles.

を用いて決定され、理論的な研究も進んだ [3], [4], [7]。しかし、サブバンド有効質量の小さな方位を決定するためには、面内で平均化されたサイクロトロン有効質量ではなく、方位毎の有効質量を測定する必要がある。そのためにはサブバンド分散曲線を測定する必要があるが、これまでに直接的に測定された例がない。

我々は、価電子サブバンドの面内分散曲線を実験的に測定する手法を確立し、これまでに Si(111) 表面下の p 型反転層に形成されるサブバンド分散を測定した [13]。実験手法には分散構造の測定手法として金属や高温超伝導体、表面の分野で成功を収めている角度分解光電子分光法 (ARPES) [14]~[18] を用いた。ARPES は、1970 年頃から開発されたバンド分散を測定する強力な手法である。近年エネルギー分解能が著しく (meV 程度) 進歩した電子分光器が市販されるようになり、また光源も放射光や強度が放射光並のヘリウム励起光が利用できるようになった。このため、細かな電子分散構造まで詳細に調べることができるようになった。

サブバンドの分散構造がわかると、サブバンドの有効質量 m^* がわかる。バンド有効質量は移動度 μ と $\mu = \frac{e}{m^*} \tau < \tau >$ という関係で結びついている。ここで $\tau >$ は電子の平均緩和時間である。平均緩和時間はフォノン散乱や、不純物散乱等各種散乱過程にて決まるものであり、それぞれの散乱を抑えることが移動度の向上につながる。一方、有効質量は結晶方位に固有のものであるため、移動度の向上には有効質量の小さな結晶方位に電気伝導の方向をとる必要がある。MOSFET のチャンネル長が電子の平均自由行程 (~10nm) 程度になると、原理的にはチャンネル中では散乱がほとんど起こらないため、移動度向上における有効質量の役割は重要度を増す。

2. 実験方法

本実験では反転層を金属極薄膜のショットキーバリアを用いて作製している (図 1)。まず、Si (111) 基板を超高真空中で 1250 °C に加熱し、表面の酸化膜を除去して清浄表面を作成する。その清浄表面上に金属を 1 原子層 (ML) 程度蒸着し加熱

すると、吸着金属はその種類と被覆量、加熱温度に応じて様々な金属吸着表面超構造を形成する [21]。表面超構造の形成過程は反射高速電子回折にてモニターする。ここでは特にインジウムが 1ML 程度吸着してできる Si(111) $\sqrt{7} \times \sqrt{3}$ - In 構造 [22] と、鉛が 1ML 程度吸着してできる Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ - Pb 構造 [23] を取り上げる。これら表面超構造は金属的でフェルミ準位近傍に高い電子状態密度を持ち、そこへシリコン側の電子も収容されるため負に帯電する。これは表面超構造にも電気陰性度というものが定義できるとして、その電気陰性度がシリコンより大きいと考えると理解しやすい。各表面超構造で状態密度が異なり帯電量が異なるが、このため表面超構造を変えることで、MOSFET のゲート電圧を変えて表面電荷密度を増減させるのと同じ効果が期待できる。

ARPES は、試料に紫外光や X 線を照射し、固体内の電子を励起させて光電効果で試料外へ放出される電子を放出角度毎にエネルギー分析する手法である。電子の表面平行方向の運動量 ($p_{//} = \hbar k_{//}$) は、運動量保存則より放出前 (固体内部) と後 (真空中) で同じであり、またエネルギー保存則より励起光のエネルギー $h\nu$ 、仕事関数 ϕ 、放出された電子の固体内での電子束縛エネルギー E_B と真空中での運動エネルギー E_{kin} の間には関係式 $h\nu = \phi + E_B + E_{kin}$ が成り立つ。光電子放出角度 θ を用いると $E_{kin} \sin^2 \theta = p_{//}^2 / 2m = \hbar^2 k_{//}^2 / 2m$ となるので、放出電子の θ と E_{kin} を測定すると、その電子の固体内での E_B と $p_{//} (k_{//})$ がわかり、バンド分散関係図を得ることができ。光電子分光装置は Gammadata-Scienta (現 VG-Scienta) 社の SES2002 を用いた。光源には同社の VUV5000He ランプを用い、モノクロメータを通して 21.2eV に単色化した。角度分解光電子分光では、励起光のエネルギーによってプローブする深さが異なる。本実験で用いた 21.2eV の真空紫外光ではプローブ深さは、表面から凡そ 10Å 程度までの領域である。

3. 実験結果

[基板キャリア濃度依存性]

同じ表面超構造、つまり同じ表面キャリア密度でも、Si 基板のキャリア密度を変えると、バルク内部へ侵入する電場の侵入長が変化する。ここでは、キャリア密度が $1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ (sample A) と $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ (sample B) の Si(111) 基板の上に Si(111) $\sqrt{7} \times \sqrt{3}$ - In を作成した。Si(111) $\sqrt{7} \times \sqrt{3}$ - In 表面における価電子帯頂上の値 V_0 は、 V_0 が既知である Si(111)7 × 7 表面の ARPES スペクトルと Si(111) $\sqrt{7} \times \sqrt{3}$ - In のスペクトルを比較することで求めることができる。この値と、バルクでの価電子帯頂上の値を境界条件としてポアソン方程式を解いた [24] バンド湾曲曲線が図 2 である。高いキャリア密度の sample A では、電場侵入長が約 30nm であるのに対し、sample B では 300nm と約 10 倍も侵入長が大きい。これらの試料を ARPES にて測定すると、sample A では図 3(a) の光電子強度マップに示すように明瞭なサブバンド分散が観測された。ここで図横軸の角度はバンドダイアグラムの波数 k にほぼ対応する。図中の白い部分が電子状態の存在する部分である。図 3(a) の横軸の電子放出角が 0°、2°、

4° の場合の光電子強度スペクトルを図 3(b) に示す。0.4eV から 0.8eV の領域にサブバンドの細かなピークが明瞭に見える。1.5eV にある大きなピークは、価電子帯の一部である。これは、価電子帯の頂上ではなく終状態の関係で $k_z((111))$ 方向にブリルアンゾーン境界 (L 点) まで進んだ地点でのバルクのバンド分散であることが知られている [25]。

一方、図 3(c) に示すスペクトルは sample B からのものである。サブバンドの鋭いピークはこの試料では観察されない。双方のバンド湾曲線から表面電場を見積もり、三角ポテンシャル近似を用いて量子準位のエネルギー間隔を計算すると、試料 A では 130meV 程度となり観測結果と一致する。試料 B では 30meV 程度となるが、明瞭に見えていない。これは測定が室温であるためスペクトルがフォノン散乱のためにぼけてしまうこと、また量子化準位が存在すると期待されるエネルギーでの閉じ込め幅が数 10nm 程度と Si 中の電子の平均自由行程 (10nm 程度) より長い場合、散乱によって量子化準位が明瞭に形成されていないために、スペクトル中に明瞭なピークの形で現れないのだと考えられる。

[表面電荷依存性]

表面超構造を変えることで、表面ポテンシャル V_0 を変えることができる。Si(111) $\sqrt{7} \times \sqrt{3}$ -In 及び Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Pb 表面超構造を用いて作成した反転層の V_0 を ARPES にて測定し、 $\sqrt{7} \times \sqrt{3}$ -In に対して $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Pb の V_0 は 0.25eV フェルミ準位へ近づくことがわかった。図 4 にポアソン方程式を用いて求めたバンド湾曲線を示す。

ARPES 測定の結果を図 5 に示す。トップサブバンドのシフトは 0.24eV であり、 V_0 のシフトとほぼ同程度であることがわかる。急峻な反転層である Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Pb では、準位間隔が大きく、その量は三角ポテンシャル近似の結果と定性的に一致した。分散曲線の曲率 (サブバンドの形状) は面内波数 $k_{//} = 0$ の近傍では、 V_0 が変化しても変化しない、すなわち有効質量は V_0 の変化に対し変化しないことがわかった。これま

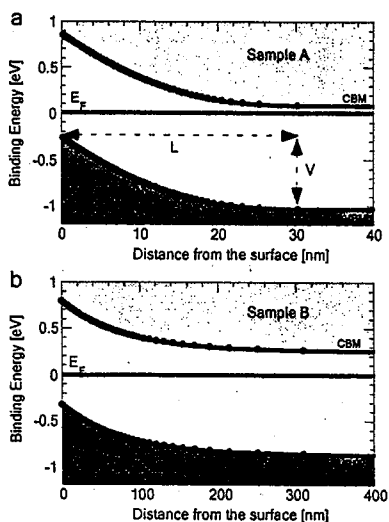


図 2 The surface band bendings induced by Si(111) $\sqrt{7} \times \sqrt{3}$ -In on the Si(111) substrates with the impurity concentrations of (a) $1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ (b) $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$.

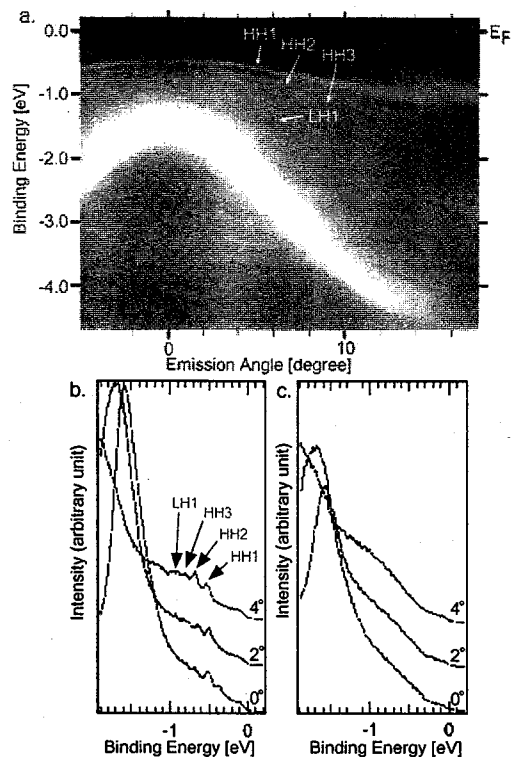


図 3 (a) The ARPES intensity map from sample A. Photoelectron emission angle in along $[11\bar{2}]$. Subbands are indicated by arrows. Strong white line corresponds to the bulk valence band. (b) Photoelectron spectrum with the different emission angles from (b) sample A and (c) sample B.

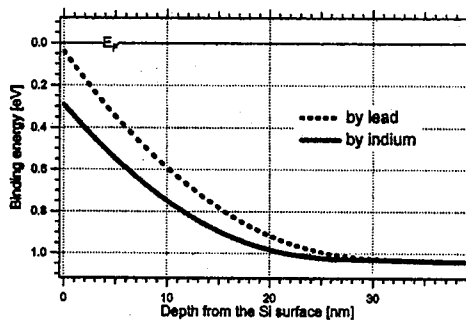


図 4 The surface band bending induced by Si(111) $\sqrt{7} \times \sqrt{3}$ -In (solid line) and Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Pb (dotted line) on the Si(111) substrate with the impurity concentration of $1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$.

で同様の研究が、MOS 構造でゲート電圧を変えながらサイクロトロン質量を測定するなどの研究で行われており [6]、サイクロトロン質量がゲート電圧に依存することが示されている。この場合、測定されたサイクロトロン質量はサブバンド分散のうち、フェルミ準位をちょうど横切っている部分の質量であり、ゲート電圧を変化させるとフェルミ準位に対してサブバンドが

シフトしてゆくため、ゲート電圧の変化によってサブバンドの異なった部分の有効質量を見ることになる。すなわちサイクロトロン質量のゲート電圧依存性は、サブバンドの2次曲線からのずれを意味している。一方、本実験ではサブバンドの形状そのものの変化を見ているため、サイクロトロン質量の結果とはこのままでは比較できない。

[バルクバンド分散との比較]

サブバンド分散がどの程度バルク分散と類似しているか興味深い。そこで大阪大学の白井教授らのグループが開発した第一原理計算ソフト OSAKA2000 [26] を用いてバルクバンド分散を計算し、測定したサブバンド分散との比較を行った。その結果、サブバンド分散はバルク分散と定性的には一致することがわかった。また Si(111) [112] 方向では、面内波数 $k_{//} = 0$ 近傍で重い正孔の有効質量が Luttinger-Kohn パラメータより計算される有効質量 ($0.57m_0$) とよい一致を示した。一方軽い正孔の有効質量は Luttinger-Kohn パラメータより計算される有効質量 ($0.15m_0$) よりも 1 割程度重いことがわかった。

[面内異方性]

Si(111) は比較的面的異方性の少ない表面であるが、ARPES でサブバンドを測定すると、重い正孔サブバンドでは、面内の [112] 方向と [110] 方向で異なる分散形状が測定された。[112] 方向では、2本の重い正孔サブバンドはほぼ縮退しているが、[110] 方向では縮退が解け、より重いものとより軽いものに分離するのである。軽い正孔サブバンドは等方的であった。この重い正孔サブバンドの異方性は、Luttinger-Kohn パラメータを用いて計算したバルクバンドでは見られない。しかし、バルクバンドを第一原理計算にて求めると、本実験でサブバンドに見られたのと同様の異方性がバルクにもあることがわかった。このことから、サブバンドの面内異方性の性質はバルクバンドと同じであると言える。

4. ま と め

Si(111) 価電子サブバンド分散構造の形状を面内異方性、表面電位依存性などの観点から調べた。複雑な構造を持つ価電子サブバンドであるが、基本的にはバルクの価電子バンドに類似した有効質量を持ち、面内異方性もバルク価電子バンドの性質と同じであることが明らかになった。最近ではサブバンド、歪

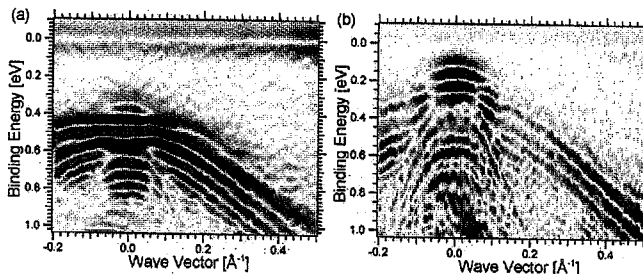


図 5 The subband dispersion structures induced by Si(111) $\sqrt{7} \times \sqrt{3}$ -In and Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Pb on the Si(111) substrate with the impurity concentration of $1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$.

みサブバンドを利用した移動度の高い MOSFET を作成しようという研究が進められている [12]。今後は ARPES と表面超構造を利用した本手法を Si(100) など他の面方位や歪みシリコンに適応し、研究、開発段階にある MOSFET との比較を行いたい。本研究の一部は JST-CREST の助成を受けて行われた。

文 献

- [1] G. Dresselhaus, A. F. Kip and C. Kittel, Phys. Rev. **98** (1955) 368.
- [2] M. Cardona, F. H. Pollak, Phys. Rev. **142** (1966) 530.
- [3] F. Stern, Phys. Rev. **B 5** (1972) 4891.
- [4] F. J. Ohkawa and Y. Uemura, Suppl. Prog. Theo. Phys. **57** (1975) 164.
- [5] K. von Klitzing, G. Landwehr and G. Dorda, Solid Stat. Comm. **14** (1974) 387.
- [6] J. P. Kotthaus and R. Ranvaud: Phys. Rev. **B 15** (1977) 5758.
- [7] T. Ando, A. B. Fowler and F. Stern, Rev. Mod. Phys. **54** (1982) 597.
- [8] K. v. Klitzing, G. Dorda and M. Pepper, Phys. Rev. Lett. **45** (1980) 494.
- [9] G. Chindalore, S. A. Harelend, S. Jallepalli, A. F. Tsch, Jr., C. M. Maziar, V. K. F. Chia and S. Smith, IEEE Electron Device Lett. **18** (1997) 206.
- [10] S. Jallepalli, J. Bude, W. K. Shih, M. R. Pinto, C. M. Maziar and A. F. Tasch, Jr., IEEE Trans. Electron Devices **44**(1997) 297.
- [11] C. Choi, J. Goo, T. Oh, Z. Yu, R. W. Dutton, A. Bayoumi, M. Cao, P. V. Voorde, D. Vook and C. H. Diaz, IEEE Electron Device Lett. **20** (1999) 292.
- [12] S. Takagi, T. Mizuno, T. Tezuka, N. Sugiyama, S. Nakaharai, T. Numata, J. Koga and K. Uchida, Solid State Electron. **49** (2005) 684.
- [13] S. N. Takeda, N. Higashi and H. Daimon, Phys. Rev. Lett. **94** (2005) 037401.
- [14] S. Hüfner, *Photoelectron Spectroscopy* (Springer, Berlin, 1996).
- [15] F. J. Himpsel, G. Hollinger and R. A. Pollak, Phys. Rev. **B 28** (1983) 7014.
- [16] A. Damascelli, Z. Hussain and Z. -X. Shen, Rev. Mod. Phys. **75** (2003) 473.
- [17] J. Osterwalder, Surf. Rev. Lett. **4** (1997) 391.
- [18] T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn, E. Rotenberg, Science **313** (2006) 951.
- [19] R. K. Hayden, D. K. Maude, L. Eaves, E. C. Valadares, M. Henini, F. W. Sheard, O. H. Hughes, J. C. Portal and L. Cury, Phys. Rev. Lett. **66** (1991) 1749.
- [20] J. A. Kash, M. Zachau, M. A. Tischler and U. Ekenberg, Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 2260.
- [21] V. G. Lifshits, A. A. Saranin and A. V. Zotov, *Surface Phases on Silicon* (John Wiley & Sons, Chichester 1994).
- [22] J. Kraft, S. L. Surnev and F. P. Netzer, Surf. Sci. **340**, (1995) 36.
- [23] K. Horikoshi, X. Tong, T. Nagao and S. Hasegawa, Phys. Rev. **B 60** (1999) 13287.
- [24] W. Mönch: *Semiconductor Surfaces and Interfaces* (Springer, Berlin, 1995).
- [25] R. I. G. Uhrberg, G. V. Hansson, U. O. Karlsson, J. M. Nicholls, P. E. S. Persson, S. A. Flodström, R. Engelhardt and E.-E. Koch, Phys. Rev. **B 31** (1985) 3795.
- [26] H. Fujita, K. Shirai and H. Katayama -Yoshida, Inst. Phys. Conf. Ser. **170** (2002) 617.