

エクステンデッド・アブストラクト

仕事関数とデバイスのバンドアライメント：基礎と計測

吉武 道子^{1,*}

¹ 物質・材料研究機構 〒305-0003 茨城県つくば市桜3-13

*Yoshitake.michiko@nims.go.jp

(2017年9月29日受理; 2018年3月6日掲載決定)

Work Function and Band Alignment of Devices: Basics & Measurements

Michiko Yoshitake^{1,*}

¹National Institute for Materials Science, 3-13, Sakura, Tsukuba, Ibaraki 305-0003 Japan

*Yoshitake.michiko@nims.go.jp

(Received: September 29, 2017; Accepted: March 6, 2018)

仕事関数は、電子が真空中に飛び出す際に感じるポテンシャルバリアであり、分析装置に用いられる電子源には仕事関数が低い材料が用いられている。電子デバイスにおいては、電圧を印加して電子を半導体から別の半導体あるいは電極金属へと移動させることが、デバイス動作の基本となっている。この移動のバリアは通常ショットキーバリア高さと呼ばれているが、「電子を一方の材料から真空中に取り出して、別の材料に電子を入れる」と考えれば、ショットキーバリア高さ（図1参照）が仕事関数と密接な関係にあることが理解できる。

まず、仕事関数が、物質により一義的に決まるのではなく表面に依存した物理量であることを説明する。例えば、表1に示すように、同じ金属でも結晶方位が異なると仕事関数の値は異なる。詳細は参考文献に譲るが、同じ原子同士の場合、表面に原子が密に並んでいる方が仕事関数は高い。fcc構造の金属では表の左から右へ結晶方位が変化するほど表面の原子密度が密になり、bcc構造の金属では逆に右から左へ変化するほど表面原子密度が密になる。仕事関数の結晶方位性にはこれが如実に反映していることが表の値からわかる。次に、仕事関数が何を表すものなのか、何によって値が決まるのか、どうやって制御するのか、について説明する。そして、界面

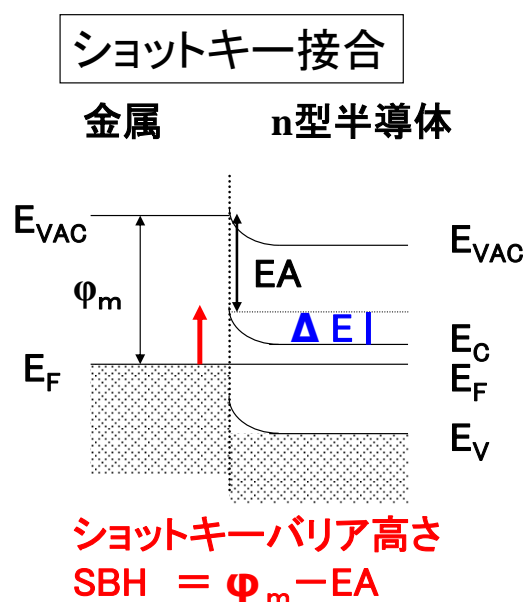


図1 仕事関数の値の異なる金属とn型半導体を接続したときに形成される理想的なショットキー接合のエネルギー模式図。両者のフェルミレベル E_F が揃う (= 平衡状態) ように接続する。真空レベル E_{VAC} が接続点でつながるようにバンド曲り ΔE が生じる。金属から半導体へ電子を注入するためのエネルギー障壁高さ = ショットキーバリア高さ SBH は、金属の仕事関数 ϕ_m と半導体の電子親和力 EA の差となる。

表1 いくつかの金属の結晶方位による仕事関数の違い

金属	結晶格子	結晶方位		
		(110)	(100)	(111)
Cu	fcc	4.48	4.59	4.94
Ag	fcc	4.52	4.64	4.74
Ni	fcc	5.04	5.22	5.35
Ir	fcc	5.42	5.67	5.76
Au	fcc	5.37	5.47	5.31
Al	fcc	4.06	4.41	4.24
W	bcc	5.25	4.63	4.47
Mo	bcc	4.95	4.53	4.55
Ta	bcc	4.80	4.15	4.00
Nb	bcc	4.87	4.02	4.36

稠密

稠密

を形成したときに仕事関数が界面両側の材料のバンド位置関係とどのように関係し、デバイスの特性にどう影響するのかなど、原理的な部分について解説する。さらに、電極のフェルミ準位と半導体・絶縁体の価電子帯との間のエネルギー位置関係 (=バンドアライメント) の評価方法の原理・実例について説明する。

参考文献

- [1] 塚田捷, 物理学 One Point 「仕事関数」, 共立出版(1992).
- [2] 岸野正剛, 難波進 (監修), 半導体デバイスの基礎, オーム社 (1985).
- [3] 吉武道子, 応用物理, **76**, 399 (2007).
- [4] 表面科学, **29** (2008) 特集「界面エレクトロニクス」(2008年2月号)
- [5] 吉武道子, 表面科学, **28**, 397 (2007).
- [6] 仕事関数/イオン化ポテンシャルの計測・評価と制御・利用 事例集, 情報機構, (2010).

査読コメント, 質疑応答

査読者 1 永富 隆清 (旭化成)

[査読者 1-1]

「物質に固有ではなく表面に依存した」とありますが, 私の理解では「物質に固有で, かつ表面状態*に依存した」です. いかがでしょうか?

*表面状態には汚染や偏析などだけではなく, 結晶面方位も含めました.

[著者]

丁寧な査読をありがとうございました。以下、修正・追加しましたのでよろしくお願いいたします。

確かに誤解を招く表現でした。意図は、多くのデバイス開発の人が仕事関数を「物質に固有の物理量」と誤解していた経験から、「物質が決まれば値が決まるものではない」ことを強調したかったので、「物質により一義的に決まるのではなく表面に依存した物理量」と修正しました。

[査読者 1-2]

表1. fcc は稠密なほど仕事関数が高く, bcc は逆の傾向があることを示されたのだと思います。本文またはキャプションに説明があると読者が理解しやすいかと思います。

[著者]

本文中に説明を追加しました。