

Title	新規デバイス応用のための2次元半導体・金属界面の理論的モデリング
Author(s)	ABDUL, GHAFAR
Citation	
Issue Date	2024-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	ETD
URL	http://hdl.handle.net/10119/19062
Rights	
Description	Supervisor: 本郷 研太, 先端科学技術研究科, 博士

氏名	ABDUL GHAFFAR		
学位の種類	博士 (情報科学)		
学位記番号	博情第 521 号		
学位授与年月日	令和 6 年 3 月 22 日		
論文題目	Theoretical modeling of 2D-semiconductor/metal interfaces for novel prototype device application		
論文審査委員	本郷 研太	北陸先端科学技術大学院大学	准教授
	前園 涼	同	教授
	大島 義文	同	教授
	岡田 将吾	同	准教授
	小口 多美夫	大阪大学	特任教授

論文の内容の要旨

High-performance electronic and optoelectronic devices rely heavily on efficient charge transport at material interfaces. This study investigates critical factors influencing contact resistance in 2D-semiconductor/metal contacts through computational modeling. We focus on two promising 2D semiconductors: phosphorene and a transition metal dichalcogenide (WS_2). A comprehensive analysis of 18 different metal electrodes (Ag, Al, Au, Co, Cr, Cu, Mo, Nb, Ni, Pd, Pt, Ru, Sc, Ta, Ti, W, V, and Zn) for phosphorene reveals the interplay between mechanical and electrical properties at the interface. This broad exploration allows for identifying optimal electrode materials that minimize contact resistance. For WS_2 , we strategically downselected six metals (Ag, Au, Cu, Pd, Pt, and Sc) with varying electronegativity and work functions. This targeted approach ensures a thorough understanding of the mechanical and electrical behavior of WS_2 /metal interfaces while maintaining applicability to diverse contact scenarios. Building upon established knowledge, we further explored the potential of substitutional dopants (C, Cl, P, N, O, and F) in WS_2 to enhance contact properties. Our investigation evaluates several interface properties for their effectiveness in reducing contact resistance and ultimately achieving superior performance in 2D semiconductor devices. Notably, our study reveals that metal selection can be a feasible approach for phosphorene-based contacts, while for WS_2 , C, P, and N-doping can lead to a reduction in Fermi level pinning (FLP), a highly desirable outcome, without compromising the mechanical stability of the interface. At the same time, Cl and F-dopants can provide a path to lower the n-type Schottky barrier height (SBH). Our method provides an alternative approach to reduce the FLP that doesn't increase the tunneling barriers, which is not observed with other interface engineering methods. This work can guide further experimental work in designing and accelerating the discovery of optimal and low-energy consuming 2D-semiconductor/metal interfaces.

Keywords: *computational modeling, semiconductor/metal interface, Schottky barrier, phosphorene, WS_2*

論文審査の結果の要旨

半導体集積回路はデジタル化社会を支える IoT 開発のための基盤技術であり、その更なる性能向上・低消費電力化には微細化・高集積化が要求される。しかしながら、従来のボトムダウン的の微細加工技術は限界に達し、その回避策として、二次元(2D)単層物質に基づくボトムアップ的の加工技術が注目されている。当該技術の実用化には、電極金属と半導体の界面(MS 界面)に発生する接触抵抗の抑制が必要である。接触抵抗は、電極金属の仕事関数と半導体のギャップ内準位の差に起因し、ショットキー障壁(SHB)と呼ばれるが、SHB は電極金属種の選択や半導体へのドーピング(元素置換)で制御可能である。最近、電界効果トランジスタ用途の 2D 半導体として整流作用の異なる黒磷(BP: p 型)と遷移金属ダイカルコゲナイド(WS_2 : n 型)が注目されているが、p 型 BP は SBH を抑制してオーミック接触を実現する電極金属種が数種既報なのに対して、n 型 WS_2 ではフェルミ準位ピンニング(FLP)に起因して SHB を抑制する電極金属種や置換元素種は未報告である。本研究は、情報科学技術を積極的に活用したハイスループット第一原理計算手法と機械学習(クラスタリング)による金属種分類法を開発し、電気的特性に加えて耐剥離性/機械的特性に優れた BP 用途の金属種を網羅的に探索し、従来金属種に比べて優れた金属種を数種発見した(Cr 等)。次いで、MS 界面電荷分布を分析し、界面電荷の増加が特性改善に繋がることを見出した。こうして確立した汎用的手法に基づき、 WS_2 に適した電極金属種と置換元素種の網羅的探索を行った。 WS_2 の SHB は、典型的な電極金属種(Cu/Ag/Au/Pd/Pt)でも抑制されるが、置換元素種として炭素原子が最も SHB を抑制し、更に機械的特性を改善することを突き止めた。次に n 型半導体で問題となる FLP を分析し、従来の金属誘起ギャップ準位だけではなく、界面双極子が重要な役割を果たすことを明らかにした。これら研究成果の一部は既に、申請者を主著者とする査読付原著論文[A. Ghaffar, *et al.*, ACS Omega **8**, 6743 (2023/IF=4.132)]に発表されており、当該コミュニティにおいて一定の評価を獲得している。

以上、本論文は、電界効果トランジスタ用途二次元半導体の電極金属・ドーピング種探索という当該分野の重要課題に対し、ハイスループット第一原理計算と機械学習を組み合わせた計算科学的手法を開発し、ショットキー障壁を抑制する金属・置換種の特定に成功したのみならず、金属・半導体界面で問題となるフェルミ準位ピンニングの起源を解明した業績として学術的に貢献するところを認め、よって博士(情報科学)の学位論文として十分価値あるものと判断した。