

ダイヤモンドデバイスの高性能化の鍵を解明 表面付近の原子レベルでの構造が果たす重要な役割



宮本 良之

みやもと よしゆき (左)
yoshi-miyamoto@aist.go.jp
ナノシステム研究部門
ナノ炭素材料シミュレーション
グループ
研究グループ長
(つくばセンター)

宮崎 剛英

みやざき たけひで (右)
takehide.miyazaki@aist.
go.jp
ナノシステム研究部門
非平衡材料シミュレーション
グループ
研究グループ長
(つくばセンター)

竹内 大輔

たけうち だいすけ (中央)
d.takeuchi@aist.go.jp
エネルギー技術研究部門
電力エネルギー基盤グループ
上級主任研究員
(つくばセンター)

私たちは、ダイヤモンド半導体がもつ、負の電子親和力など他の半導体材料にはない新しい物性を解明するとともに、ダイヤモンド半導体特有の物性を応用した新しい電子デバイス、特に真空パワースイッチなど革新的なパワーデバイスの創出を目指しています。また、狙った物性を引き出すプロセスを材料科学の視点で提供し、第一原理計算に基づく予測で、実験的研究を先導することを目指しています。

関連情報：

● 参考文献

Y. Miyamoto *et al.*:
Appl. Phys. Lett., 103,
123104 (2013).

● プレス発表

2013年9月13日「ダイヤモンド電子放出デバイスの高性能化の鍵を理論的に解明」

●この研究開発は、独立行政法人 科学技術振興機構の支援を受けて行っています。

ダイヤモンドデバイスへの期待と課題

ダイヤモンドは低い電圧で高効率の電界放出特性をもつため、ケイ素などでは作ることができない新しい原理の電子デバイスを、ダイヤモンドを使って実現することが期待されています。電界放出特性を安定させるためにさまざまな表面化学修飾が考えられてきましたが、化学修飾することにより電界放出効率が下がるといった問題などもあり、電界放出特性を決定する仕組みの解明が待たれていました。また、従来から、負の電子親和性をもつ表面化学修飾が高効率の電界放出を達成することの鍵とされてきました。

電界放出効率が下がる原因

今回私たちは、密度汎関数理論に基づく第一原理計算で、さまざまな化学修飾されたダイヤモンド表面の構造(図1)を決定し、その原子レベルでの電子親和性を調べました。その結果、水素修飾表面と水素・水酸基修飾表面では負の電子親和性が、何も化学修飾されていない表面では正の電子親和性があることがわかりました。

次に、表面に電圧をかけ、真空中に出てくる電子数を時間の関数としてカウントすることで電界放出特性を比較しました。その結果、負の電子親和性をもつ水素修飾された表面からの電

界放出特性は正の電子親和性をもつ無修飾の表面のそれを上回る結果となり、過去の研究と一致しました。一方、負の電子親和性をもつ水素と水酸基の混合により化学修飾された表面は、正の電子親和性をもつ無修飾表面よりも電界放出効率が低いことがわかり、電子親和性だけが電界放出特性を決定する要因ではないことがわかりました。

表面における電子のポテンシャルを詳細に調べると、水素と水酸基の混合により化学修飾された表面はダイヤモンド内部から真空に向かうにつれて表面酸素に起因した電子を束縛しようとする、いわばポテンシャルの井戸のような領域があることがわかりました(図2)。真空領域におけるポテンシャルの高さは、無修飾の表面よりも低いものの、ポテンシャルの井戸が電子の効率の良い放出を妨げていることが、電子のダイナミクスを調べたことからわかりました。

今後の予定

シミュレーションで表面の凹凸を考慮したり欠陥構造の分布を表現できる大きなモデルを想定したりすることにより、実験的研究に必要な試行回数を減らすことで研究を加速することを目指します。

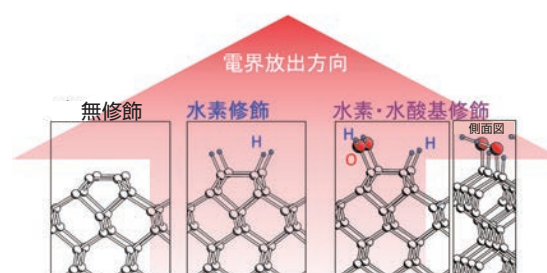


図1 シミュレーションで想定したさまざまなダイヤモンド表面構造

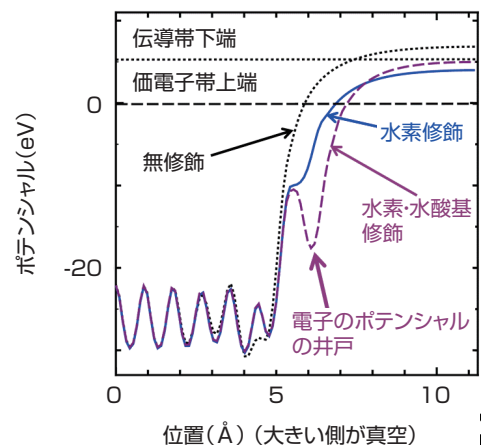


図2 各表面において電子が感じるポテンシャル表面に対し平行方向は平均されている。