

非平衡グリーン関数を用いたグラフェンナノリボン配線伝導特性へのエッジ揺らぎ効果の第一原理計算

First-principle calculations of edge roughness effects on electrical properties of graphene nano-ribbon interconnects using non-equilibrium Green's function methods

慶大院理工¹, 1, 超低電圧デバイス技術研究組合(LEAP)²

○^(M2) 簗崎勝也¹, Aizuddin Mohamad¹, 酒井忠司², 栗野祐二¹

Keio Univ.¹, Low-power Electronics Association & Project (LEAP)²

○Katsuya Yabusaki¹, Aizuddin Mohamad¹, Tadashi Sakai² and Yuji Awano¹

E-mail: awano@elec.keio.ac.jp

【はじめに】 現在の LSI 銅配線は微細化とともに急激な抵抗増加が見込まれ、代替案としてナノカーボン材料に期待が持たれている。グラフェンはナノメートル幅（グラフェンナノリボン、以下 GNR）に加工できる点で微細横配線材料候補として注目される。他方、GNR はその細さ故に導電特性がエッジの影響を強く受けることが知られており[1]、また配線抵抗低減にはキャリア数の増加が有効であるため[2]、フェルミエネルギーが比較的高い状態(~1eV)までのエッジ揺らぎ効果を検討する必要がある。今回、その観点で、GNR の伝導特性に対するエッジ揺らぎの影響について理論検討したので報告する。

【計算手法とモデル】 本研究ではアームチェア型エッジを持つ GNR(以下 AGNR)にエッジ揺らぎを与え、それによる導電特性(透過係数)の変化について、非平衡グリーン関数(NEGF)を用いた第一原理計算法で解析を行った。解析には QuantumWise 製 Atomistix Toolkit(ATK)を利用した。ここで交換相関汎関数としては局所密度近似を用いた。図 1 にモデル構造を示す。GNR は幅が炭素原子 15 個分の約 1.7nm、長さ 5.0nm とし、その外側に電位を固定したグラフェン領域（電極相当）を設けた。揺らぎは 1 段揺らぎ（六員環 1.5 個分,0.37nm）と 2 段揺らぎ（六員環 2.5 個分,0.61nm）の 2 種類を仮定し、片側あるいは両側に揺らぎを入れた場合の透過係数 $T(E)$ を求めた。なお GNR の総面積は一定としている。

【解析結果】 図 2 は、各種エッジ揺らぎに対する AGNR 透過係数の電子エネルギー依存性を示す。1eV で比較すると、透過係数は片側 1 段揺らぎの導入で約 2/3、2 段揺らぎでは 1/2 に減少することが分かる。また 1 段揺らぎで片側 2 か所と数が増えても余り変化はないが、両側にあるとさらに 40% 減となることが分かる。両側複数個揺らぎがある時の揺らぎ位置と透過係数の関係などについては当日報告する。

【まとめ】 第一原理/非平衡グリーン関数法シミュレーションによって、各種エッジ揺らぎに対する ANGR 透過係数の 1eV までの電子エネルギー依存性を解析した。その結果、透過係数には、揺らぎの大きさの絶対値が強い影響を持つことが分かった。

【謝辞】 本研究は NEDO および経産省の支援する「低炭素社会を実現する超低電圧デバイスプロジェクト」にて実施した。

【引用文献】 [1] 例えば D. A. Areshkin, et al., Nano Lett.7 204 (2007)、[2] H. Miyazaki et al., SSDM, C-5-3, pp.678 (2013)

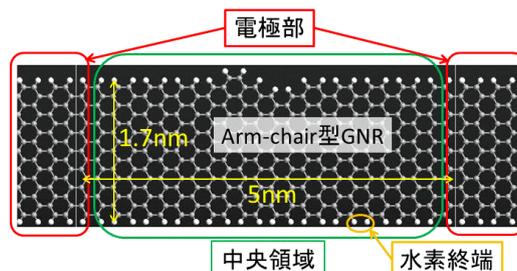


図 1 AGNR の解析モデル

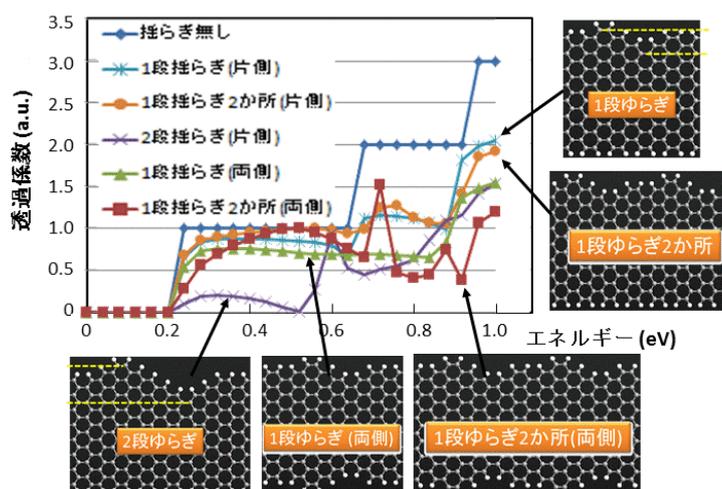


図 2 AGNR の透過係数の各種エッジ揺らぎ依存性