

## InAs ナノワイヤの電子構造および電気伝導率に関する理論的検討

## Electronic structure and electrical conductivity of InAs nanowires

三重大院工, ○秋山 亨, 中村浩次, 伊藤智徳

Mie University, ○Toru Akiyama, Kohji Nakamura and Tomonori Ito

E-mail: akiyama@phen.mie-u.ac.jp

【はじめに】半導体ナノワイヤは次世代ナノデバイスの構成要素として注目され、その形状および構造制御が可能となってきている。特に、III-V化合物半導体材料によって作製されるナノワイヤでは、バルク状態での結晶構造(閃亜鉛鉱構造)とは異なる結晶構造(ウルツ鉱構造)や回転双晶等の積層欠陥の形成が可能になっている。[1]さらに近年では、InAsナノワイヤにおいてこれら結晶構造および積層欠陥に起因して電気伝導率や移動度が大幅に変化することも報告されている。[2,3]しかしながら、これら結晶構造および積層欠陥がナノワイヤの電気的性質におよぼす影響に関しては不明な点が多い。これまでに我々は、理論計算に基づきIII-V化合物半導体ナノワイヤの構造および電子状態を解析し、直径の小さなナノワイヤにおいてはサイズ効果によって特異な電子構造が出現する可能性を指摘してきた。[4]本研究では、密度汎関数理論に基づく電子状態計算により、異なる結晶構造を持つInAsナノワイヤの電子状態の詳細と電気伝導率を解析する。

【計算方法】密度汎関数理論にもとづく一般化勾配近似により、ナノワイヤ側面を擬似水素で終端した閃亜鉛鉱(ZB)構造およびウルツ鉱(WZ)構造のナノワイヤでのバンド構造を計算する。さらに、得られたバンド構造からボルツマン方程式[5]を用いて電気伝導率を計算する。

【結果および考察】FIG.は密度汎関数計算によって得られた、ZB 構造および WZ 構造の InAs ナノワイヤ(直径~1.3 nm)のバンド構造を示したものである。この図から、両構造においてエネルギーギャップ値がサイズ効果によって~1.3 eV 程度増大していることがわかる。また、ZB 構造およびWZ構造のナノワイヤにおける電子の有効質量はそれぞれ 0.06 および 0.42 となりバルク状態での計算値(それぞれ 0.015 および 0.012)に比べ大きな値をとる。特に WZ 構造のナノワイヤにおける有効質量は、ZB 構造のものに比べて7倍の値になっており、これらの違いがナノワイヤの電気伝導率および電子移動度に影響をおよぼすものと考えられる。

講演では、ボルツマン方程式によって得られたこれらナノワイヤにおける電気伝導率に関する解析結果についても議論する。

【参考文献】 [1] L. Dick et al.: *Semicond. Sci. Technol.* 25 (2012) 240009. [2] C. Thelander et al.: *Nano Lett.* 11 (2011) 2424. [3] M. L. J. Sourribes et al.: *Nano Lett.* 14 (2014) 1643. [4] T. Akiyama et al. *Nano Lett.* 10 (2010) 4614. [5] G. K. Madsen and D. J. Singh: *J. Comput. Phys. Commun.* 175 (2006) 67.

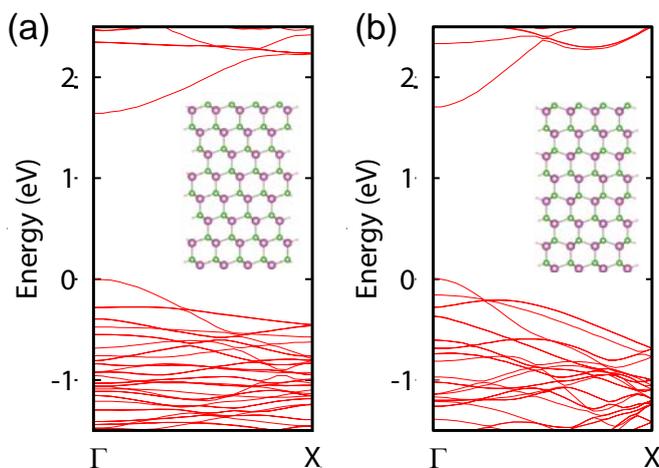


FIG: Calculated one-dimensional band structures of (a) zinc blende and (b) wurtzite structured InAs nanowires obtained by density functional calculation. The energy of valence band maximum is set to zero. Geometries are also shown.