

単原子層 Ge ナノリボンの電子移動度解析

Atomistic Simulation of Electron Mobility in Monolayer Ge Nanoribbons

神戸大工¹, 阪大工², JST CREST³ ○森 規泰¹, 下井田 健太¹, 土屋 英昭^{1,3}, 鎌倉 良成^{2,3},
森 伸也^{2,3}, 小川 真人¹Kobe Univ.¹, Osaka Univ.², JST CREST³ ○N. Mori¹, K. Shimoida¹, H. Tsuchiya^{1,3},Y. Kamakura^{2,3}, N. Mori^{2,3}, M. Ogawa¹

E-mail: 147t263t@stu.kobe-u.ac.jp

グラフェンに代表される単原子層材料は、高い電子移動度を示し、短チャネル効果の抑制にも優れていることから、高性能 FET のチャネル材料として期待されている。しかしながらグラフェンはバンドギャップを持たないため、スイッチング素子へ応用するにはナノリボン構造への加工などが必要とされている。一方、最近その作製の成功例が報告された Ge の単原子層膜 (germanane; ゲルマナン) は、1eV 以上のバンドギャップを持ちながら、バルク Si の約 10 倍の電子移動度を持つことが理論的に報告され注目を集めている[1]。また、バンド構造が直接遷移型に変化することから、次世代の光デバイス材料としても有望と考えられている[1]。そこで本稿では Tight-Binding(TB)法に基づく電子のバンド構造と Keating ポテンシャル法に基づくフォノンのバンド構造を結合させる計算手法[2]を用いて、ゲルマナンナノリボンのバンド構造と電子移動度を解析した結果を報告する。

図 1 にアームチェアエッジ型ゲルマナンナノリボンの原子モデルを示す。ここで、(a)鳥瞰図、(b)上 (<111̄> 方向) から見た図、(c)横 (<110> 方向) から見た図である。ゲルマナンの FET 応用を考える場合、チャネルの幅方向は有限サイズとなるため、本研究ではゲルマナンナノリボンの電子輸送特性を調べることにした。但し、リボン幅 W は数 nm ~ 数十 nm とし、グラフェンナノリボンの幅よりも約 1 桁大きいサイズを考えた。また文献[1]で報告されたゲルマナンは、ゲルマニウム化カルシウム (CaGe₂) のデインターカレーションを用いて、水素終端した Ge (GeH) の結晶格子として作製されているため、sp³ 混成軌道を維持していると考えられている。そのため図 1(c)に示すように、完全な平面構造とはならず、バルク Ge のダイヤモンド構造をある程度維持した buckled 構造を形成する。本研究では簡単化のために、バルク Ge の原子間距離とその<111̄> 方向の buckling 距離を用いて計算を行った。図 2 に、W = 20 nm のゲルマナンナノリボンの電子のバンド構造を示す。前述した通り、直接遷移型に変化したことが確認できる。またそのバンドギャップは 1.437 eV であり、厚み方向と幅方向の量子閉じ込め効果により、バルク Ge のバンドギャップ (0.67 eV) の 2 倍以上にまで増大している。伝導帯最下端の有効質量は 0.054 m₀ であり、バルク Ge の L バレーの横有効質量よりも軽い値が得られている。その理由は現在検討中である。次に、電子移動度のリボン幅依存性を計算した結果を図 3 に示す。最も特徴的な点として、W = 11.6 nm の時に電子移動度が最大値を示すことが挙げられる。その理由を W を減少させながら説明する。まず W = 28 nm の時、輸送に参与するサブバンド数 N_{sub} は電子のバンド構造から 3 個であることが分かっている。したがって W を 28 nm から減少させると、幅方向の量子化エネルギーの増大によって N_{sub} は徐々に減少し、その結果、フォノン散乱レートが低下して移動度が増加する。そして、W = 11.6 nm の時に N_{sub} = 1 となり移動度は最大となる。W を 11.6 nm よりも小さくすると、電子-フォノン相互作用の強さと電子の有効質量が増大する効果が支配的になり[2]、移動度は急激に減少する。その結果、W = 11.6 nm の時に電子移動度が最大値を示したと考えている。文献 [1] E. Bianco et al., ACS-NANO 7 (2013) 4414. [2] Y. Yamada et al., JAP 111 (2012) 063720.

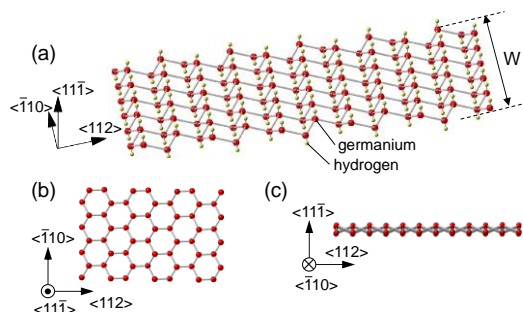


Fig. 1 Atomic model of armchair-edged germanane nanoribbon. <112> and <110> are the transport and width directions, respectively.

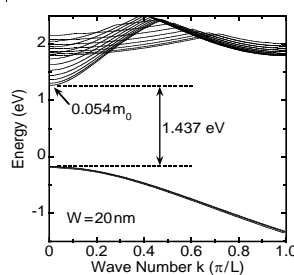


Fig. 2 Electron band structure computed for W = 20 nm.

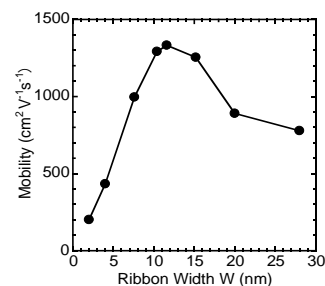


Fig. 3 Computed electron mobilities of armchair-germanane nanoribbon as a function of W.