

原子論的アプローチに基づく Ge ナノワイヤの電子移動度解析

Atomistic Simulation of Electron Mobility in Ge Nanowires

神戸大工¹, 阪大工², 立命館大理工³, JST CREST⁴ 下井田 健太¹, 森 規泰¹, ○土屋 英昭^{1,4},
鎌倉 良成^{2,4}, 森 伸也^{2,4}, 宇野 重康^{3,4}, 小川 真人¹Kobe Univ.¹, Osaka Univ.², Ritsumeikan Univ.³, JST CREST⁴ K. Shimoida¹, N. Mori¹,○H. Tsuchiya^{1,4}, Y. Kamakura^{2,4}, N. Mori^{2,4}, S. Uno^{3,4}, M. Ogawa¹

E-mail: tsuchiya@eedept.kobe-u.ac.jp

ゲートオールアラウンド型 Si ナノワイヤ FET は短チャネル効果の抑制等に優れていることから、将来の集積化デバイスの中核技術の一つとして注目されている。また更なる高性能化を目指して、Ge や InAs 等の高移動度半導体ナノワイヤの導入も積極的に検討されている。ナノワイヤ FET の本格的な実用化が期待されるゲート長が ~ 10 nm 以下の領域では、ナノワイヤ断面内の原子数は数えられる程度にまで減少するため、電子だけでなくフォノンもバルクとは異なる振る舞いを示すと考えられている。したがって、その性能を正確に予測するには、電子系とフォノン系の両者を原子論的アプローチで表現し、キャリアの輸送特性に原子配列の影響を反映した解析・設計手法が必要になってくる[1,2]。本稿では、Tight-Binding (TB) 法に基づく電子のフルバンド構造と Keating ポテンシャル法に基づくフォノンのフルバンド構造を結合させる手法[2]を用いて、Ge ナノワイヤの電子移動度を原子レベルで評価した結果を報告する。

Ge ナノワイヤの電子バンド構造とフォノンバンド構造の計算結果を図 1 に示す。電子バンド構造は $sp^3d^5s^*$ モデルに基づく TB 法を用いて計算した。電子バンド構造中の赤線の分散曲線は、後述する電子移動度の計算に用いたサブバンドを表している。図中に示した基底サブバンドの有効質量の値を軽い順に並べると、(1) $\langle 110 \rangle$ 、(2) $\langle 112 \rangle$ 、(3) $\langle 111 \rangle$ 、(4) $\langle 100 \rangle$ となる。この関係は、ワイヤ断面サイズが $W=1.5 \sim 4$ nm の範囲で成り立つことを確認している。 $\langle 110 \rangle$ と $\langle 112 \rangle$ は有効質量が近い値を示すが、 $\langle 112 \rangle$ ではブリルアンゾーン端の高次サブバンドとのエネルギー差が小さいため、散乱レートが増大し電子移動度の点では $\langle 110 \rangle$ よりも不利になると予想できる。また、Ge ナノワイヤでは、バルク Ge の L バレーと X バレーの多谷性を反映して、その伝導帯端に複数のサブバンドが現われるのが特徴である。次にフォノンバンド構造であるが、4 方向とも同様の分散曲線になっているが、 $q \rightarrow 0$ (長波長) の領域では $\langle 110 \rangle$ 方向のみ回転対称性がないため TLA1 と TLA2 の縮退が解けている[2]。

図 1 のバンド構造をフェルミの黄金律に適用し、線形化したボルツマン方程式から電子移動度を計算した結果を図 2 に示す。横軸は断面サイズ W とし、比較のために Si ナノワイヤの結果[2]を合わせてプロットしている。予想通り、Ge ナノワイヤの電子移動度は、有効質量が最も軽い $\langle 110 \rangle$ 方向で最大となっている。その他の 3 方向は図 1 の有効質量の値に対応して大小関係が決まっている[2]。ところが $W \sim 2$ nm まで細くなると、 $\langle 110 \rangle$ 、 $\langle 112 \rangle$ 、 $\langle 111 \rangle$ の移動度がほぼ同じ値に収束するのが分かる。さらに、それらは Si

の $\langle 110 \rangle$ 方向の値に一致している。2 nm 以下という極細半導体では、構成元素の違いよりも、原子配列の方が電子の輸送特性に支配的な影響を与えることを示唆している[3]。

文献 [1] N. Neophytou et al., *PRB* **84** (2011) 085313. [2] Y. Yamada et al., *JAP* **111** (2012) 063720. [3] M. V. Fischetti et al., *IEEE-ED* **38** (1991) 650.

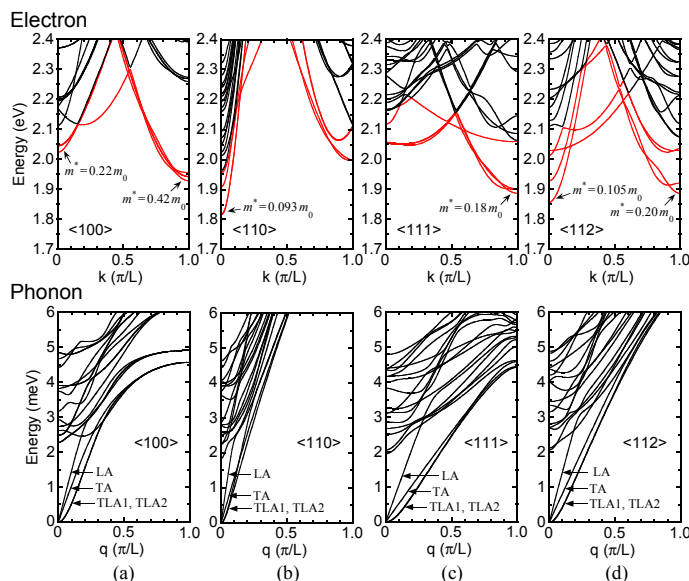


Fig. 1 (Upper) Electron and (lower) phonon band structures computed for (a) $\langle 100 \rangle$ -, (b) $\langle 110 \rangle$ -, (c) $\langle 111 \rangle$ -, and (d) $\langle 112 \rangle$ -oriented Ge nanowires. The wire cross section is about 3×3 nm² for all nanowires.

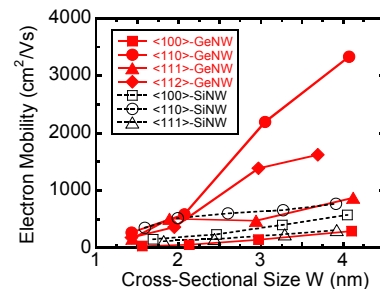


Fig. 2 Computed electron mobilities of Ge and Si nanowires as a function of the wire cross-sectional size W .