

単原子層半導体における局在不純物の電子輸送特性への影響

Effect of localized impurities on electron transport in single-layer semiconductors

筑波大電物 °五十嵐 玲太, 植田 暁子, 佐野 伸行

Inst. Appl. Phys., Univ. of Tsukuba °Reita Igarashi, Akiko Ueda, Nobuyuki Sano

E-mail: igarashi@hermes.esys.tsukuba.ac.jp

【はじめに】半導体デバイスの単純微細化の限界に伴い、将来デバイスへの応用を目指したデバイスの3次元構造化や新規材料探索などの研究が活発化している。しかも、このような将来デバイスの構築は、ナノスケール領域で展開されることはほぼ間違いない。このように微細なデバイス構造においては、局在した不純物や欠陥等による均質な系からの揺らぎがデバイス特性評価において決定的に重要となる[1]。

このような背景のもと、リーク電流の抑制やゲート制御性の観点から、バンドギャップを有する単原子層 MoS_2 が次世代デバイスのチャネル材料として注目されている[2]。しかしながら、理想的膜質のもとでの単原子層 MoS_2 の輸送特性はすでにモンテカルロ法などによって検討されているが、不純物や欠陥等を含んだ系での輸送シミュレーションは殆ど着手されていない。そこで我々は、ナノ構造デバイスへの応用を想定して、局在性を考慮した不純物散乱モデルを2次元モンテカルロ法に導入し、単原子層 MoS_2 をチャネルとしたデバイス特性評価の検討を進めている。本報告では、当該グループで導入した局在不純物モデルの正当性と不純物散乱のバルク輸送特性への影響を考察する。

【計算手法】平均不純物濃度に対応するイオン化不純物を単原子層 MoS_2 にランダム分布させた系のもとで、周期的境界条件を課したバルク構造で2次元モンテカルロ・シミュレーションを実行した。イオン化不純物の散乱ポテンシャルは、湯川型遮蔽クーロンポテンシャルで近似した。不純物の作るランダムなポテンシャル場と一様な外場 ($E = 10 \text{ kV/cm}$) のもとで電子をドリフト運動させることで、電子移動度を不純物濃度の関数として評価した。また、用いた2次元モンテカルロ・シミュレータでは、K点およびQ点にある2種類のバレーを考慮し、電子は単純な放物線型バンド構造を用いた。散乱機構としては、バレー内及びバレー間音響フォノンおよび光学フォノン散乱を考慮した。

【計算結果と考察】2次元モンテカルロ・シミュレーションより求めた、温度が $T = 300$ および 77 K での電子移動度を不純物濃度の関数として図1に示す。また、フォノン散乱のみで得られる電子移動度を破線で示す。不純物濃度の増加とともに移動度が低下、また温度が下がるにつれてフォノン散乱が抑制されるために移動度が大きくなるといった一般的な傾向がシミュレート

できている。より重要な点は、不純物の局在性を考慮するために散乱ポテンシャルをあからさまにポテンシャル場としてシミュレーションに導入していることである。その結果、通常の散乱頻度を用いた散乱過程ではなく、電子のドリフト運動に対する揺動として不純物散乱が導入されている。従って、不純物濃度によって変化する遮蔽長を考慮のうえ、ポテンシャル場を補間するメッシュサイズの最適化が重要になる。図1には、メッシュサイズが 1 nm および 0.5 nm のときの結果を示す。 $T = 77 \text{ K}$ の全領域および 300 K の高濃度領域で若干のメッシュ依存性が見られるが、この差は計算誤差の範囲にあることから、有意な差とは考えられない。従って、いずれのメッシュサイズにおいても殆ど同じ電子移動度が得られており、いずれの不純物濃度および温度に対しても最適化が正しくなされていると言える。しかしながら、今回のシミュレーションでは長距離ポテンシャルが完全に遮蔽されている。高濃度領域では長距離成分のダイナミカルな効果（プラズマ振動）も重要となることから、電子間相互作用を導入して、さらに詳細に検討を行う予定である。

【参考文献】

- [1] 例えば、N. Sano, J. Appl. Phys. **118**, 244302 (2015).
- [2] B. Radisavljevic and A. Kis, Nature Materials **12**, 815 (2013).

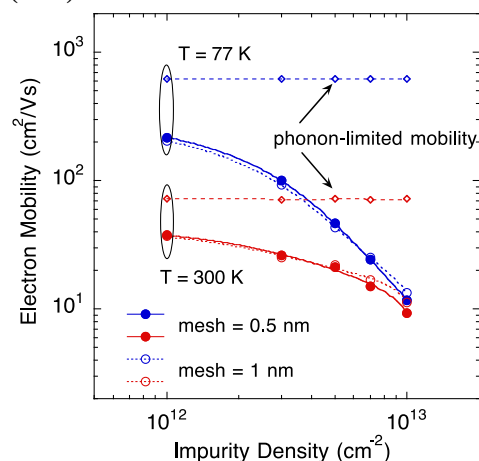


Fig.1: Electron mobility obtained from the 2-D Monte Carlo simulations for MoS_2 at $T = 300$ and 77 K as a function of impurity density. The mobility is evaluated by employing the two different mesh-sizes (1 and 0.5 nm) and the dashed lines represent the phonon-limited mobility in MoS_2 .