

シリケイン及びゲルマナンをチャンネルとする CMOS トランジスタの バリスティック性能解析

Ballistic Modeling of Silicane and Germanane CMOS Transistors

神戸大工 兼古 志郎, 岡 直左, 土屋 英昭, 小川 真人

Kobe Univ. S. Kaneko, N. Oka, H. Tsuchiya, M. Ogawa

E-mail: 140t222t@stu.kobe-u.ac.jp

グラフェンの発見とそれに続く爆発的なグラフェン研究の広がりにより、様々な2次元シート材料の作製が試みられ始めている。中でも Si 及び Ge で構成される単分子層ハニカム格子は、現在のシリコンテクノロジーとの親和性の良さから注目を集めている。最近、ゲルマニウム化カルシウム(CaGe₂)のイオン脱離反応を用いて水素終端された単分子層材料である Germanane(ゲルマナン)の作製が報告され、その構造と電子状態との関係が明らかにされた[1]。一般的な単分子層材料では sp² 結合により平面構造が形成されるが、[1]で作製されたゲルマナンでは単分子層上下のダングリングボンドを水素終端する効果により sp³ 結合が維持され、単分子層状態でも 1eV 程度のバンドギャップを有することが大きな特徴である。また、ゲルマナンはバルク Ge の約 5 倍という高い電子移動度が理論予測されており[1]、電子デバイス等への応用にも期待が集まる。本稿では、強束縛(TB)近似法を用いてシリケイン及びゲルマナンの電子バンド構造を解析するとともに、それらのバリスティック輸送下での FET チャンネルとしての性能を評価した。

図 1 にシリケイン及びゲルマナンの原子モデルを示す。その幾何学的構造を決めるパラメータ a , d , Δz , d_H の値は、第一原理計算で得られた最適構造に対する理論値[2]を用いた。本研究では sp³d³s* TB 法によりバンド構造を求めるが、Si 原子、Ge 原子及び水素原子の TB パラメータは文献[3,4]を採用し、上述の最適構造で生じるひずみの効果はハリソン則[5]で取り入れた。また、価電子帯上端の再現性を高めるためスピン軌道間相互作用を考慮した[6]。その結果を第一原理計算の結果[2]と比較し図 2 に示す。図 2 よりシリケインは間接遷移型、ゲルマナンは直接遷移型となることが分かる。伝導帯最下端付近と価電子帯最上端付近の分散関係は、第一原理の結果と良い一致が見られる。このことは表 1 に示した有効質量の値からも確認できる。以上より、TB 近似法によっても妥当なバンド構造が得られることが確認できる。次に、Top-of-the-barrier モデル[7]を用いて、シリケイン及びゲルマナンをチャンネルとするダブルゲート構造 MOSFET のバリスティック輸送下での I_D - V_G 特性を計算した結果を図 3 に示す。ここで $I_{off} = 5\text{nA}/\mu\text{m}$, $V_D = 0.5\text{V}$ とした。 $T_{ox} = 3\text{nm}$ の場合には、nMOS、pMOS ともにゲルマナンチャンネルの方が高い電流値を示すが、 $T_{ox} = 0.5\text{nm}$ の極薄ゲート酸化膜厚では、これらが逆転し、シリケインチャンネルの方が高い電流値を示す結果となっている。これは、トンネルリーク電流が無視できる条件下では、シリケインチャンネルの方がキャリアの状態密度が大きいこと量子キャパシタンスの影響が少なくなり、その分ゲート容量の低下が抑えられるためである[8]。

文献 [1] E. Bianco et al., *ACS Nano* 7 (2013) 4414. [2] K. L. Low et al., *IEEE-TEDE* 61 (2014) 1590. [3] T. B. Boykin et al., *PRB* 69 (2004) 115201.

[4] Y. Zheng et al., *IEEE-TEDE* 52 (2005) 1097. [5] J. M. Jancu et al., *PRB* 57 (1998) 6493. [6] G. Dresselhaus et al., *PR* 100 (1955) 580. [7] A. Rahman et al., *IEEE-TEDE* 50 (2003) 1853. [8] K. Shimoida et al., *IEEE-TEDE* 60 (2013) 117.

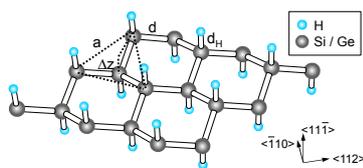


Fig. 1 Atomic model of silicane and germanane. a : lattice constant, d : interatomic distance, Δz : vertical distance between nearest atoms, d_H : interatomic distance from H atoms.

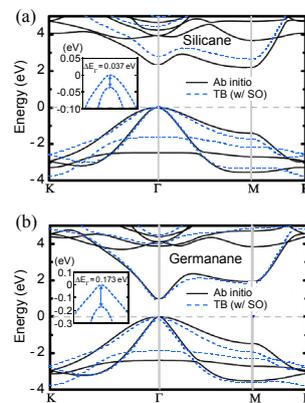


Fig. 2 Band structures computed for (a) silicane and (b) germanane considering spin-orbit (SO) interaction. The insets show the enlarged views around valence band maximum.

Table I. Band parameters obtained from the band structure calculations.

	Silicane		Germanane	
	Ab initio	TB (w/ SO)	Ab initio	TB (w/ SO)
m_n^* (M \rightarrow Γ)	3.230	1.620	—	1.610
m_n^* (M \rightarrow K)	0.123	0.124	—	0.111
$m_{p,h}^*$ (Γ \rightarrow K)	0.573	0.664	0.516	0.723
$m_{p,h}^*$ (Γ \rightarrow M)	0.603	0.586	0.540	0.610
$m_{p,h}^*$ (Γ \rightarrow K)	0.151	0.131	0.097	0.0911
$m_{p,h}^*$ (Γ \rightarrow M)	0.142	0.135	0.100	0.0875
m_n^* (Γ \rightarrow K)	—	0.175	0.096	0.109
m_n^* (Γ \rightarrow M)	—	0.264	0.087	0.125
E_g (eV)	2.188	2.640	0.959	0.901

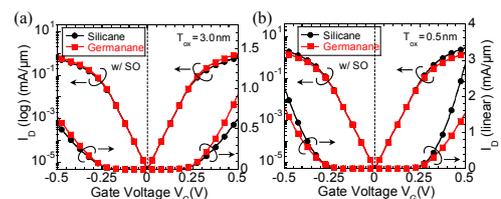


Fig. 3 I_D - V_G characteristics of double-gate silicane and germanane FETs under ballistic transport. $T_{ox} =$ (a) 3.0 and (b) 0.5 nm. The gate oxide is SiO₂. The transport direction is $\langle 110 \rangle$ in Fig. 1.