

グラフェンナノリボン移動度のエッジ揺らぎおよびリボン幅依存性の モンテカルロシミュレーション

Monte Carlo Simulations of Edge-Roughness-Scattering- and Remote-Scattering-Limited Mobility in Graphene Nanoribbons and its Line Width Dependency

¹慶大理工 [○]伊藤 直人¹、三澤 太一^{1*}、栗野 祐二¹

¹Keio University, [○]N. Ito¹, T. Misawa^{1*} and Y. Awano¹, E-mail: awano@elec.keio.ac.jp

【はじめに】グラフェンナノリボン(GNR)はその優れた電子輸送特性ゆえに次世代配線材料として注目されている[1]。しかしながら GNR にも Cu 配線と同じように線幅の減少に伴って電気抵抗(キャリア移動度)が減少することが実験的に報告され[2]、その理論的かつ定量的な解釈が求められている。Misawa らは[3]、エッジ散乱を考慮したモンテカルロ(MC)シミュレーション法によって、この微細線幅での移動度低下をある程度定量的に再現できた。しかしながら、幅 100nm 以上で実験値からのずれがあった。そこで今回、より広範囲の線幅で移動度の線幅依存性が再現できる定量的モデルの改善を行った。

【シミュレーションモデル】 キャリア輸送の解析には MC 法を用いた。また GNR のバンド構造の計算には第一原理計算法を用いた。Fig. 1 は、今回使用した 2 層 GNR の実空間モデルを示す。ここでエッジ揺らぎ(Edge Roughness, ER)もモンテカルロ法によって作成した。具体的には、揺らぎの頻度と大きさ(振幅・広がり)の平均値をパラメータとし、乱数を使って複数のガウス関数の重ね合わせとして ER を形成した。考慮した散乱機構としては、グラフェン内のフォノン散乱、イオン化不純物散乱、ER 散乱[3]に加え、新たに非弾性 ER 散乱、リモートフォノン散乱、リモート不純物散乱を考慮した。

【結果と考察】 Fig. 2 は、SiO₂ 基板上に置かれた GNR の移動度のエッジ揺らぎおよび配線幅依存性を示す。太い線幅(>100 nm)では移動度は線幅によらずほぼ一定になるが、今回導入した散乱機構によって実験値を良く再現できることが分かった。100 nm 以下の線幅依存性も良く再現でき、線幅が小さくなる程、エッジ揺らぎの影響が強くなる。実験値との比較からモデルの定量性が大きく向上したことが分かる。

【謝辞】 本研究は経済産業省および NEDO の委託事業「低炭素社会を実現する超低電圧デバイスプロジェクト」の一環として実施した。日頃よりご助言を頂く東芝の梶田明広氏、酒井忠司氏に深謝します。

【参考文献】 [1] Y. Awano, IEEE IEDM 15.1 (2015), [2] Y. Yang et al., IEEE EDL, Vol. 31, No. 3 (2010), [3] T. Misawa et al., JJAP, Vol. 54, No.5 (2015) *Present address: Sumitomo Electric Industries, Ltd.

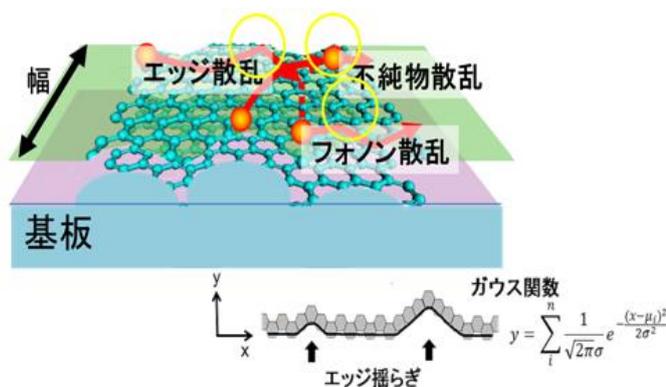


Fig. 1 Schematic of bilayer GNR real space edge roughness model

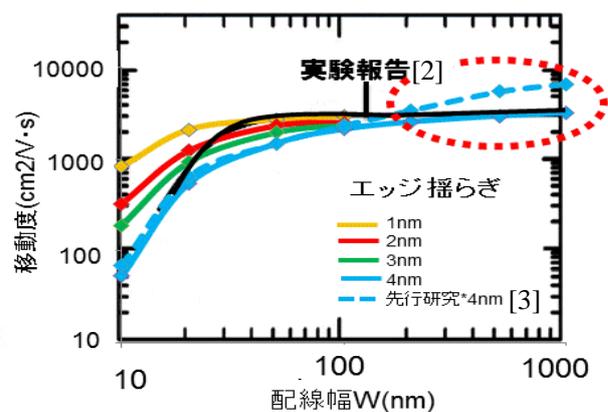


Fig. 2 Dependency of edge roughness and line width on carrier mobility in GNR