2次元材料における層間トンネル過程の非平衡グリーン関数解析

NEGF simulation of inter-layer tunneling in 2D materials

○三島 嵩也，橋本 風渡，森　伸也 (阪大工)

○Takaya Mishima, Futo Hashimoto, and Nobuya Mori (Osaka Univ.)

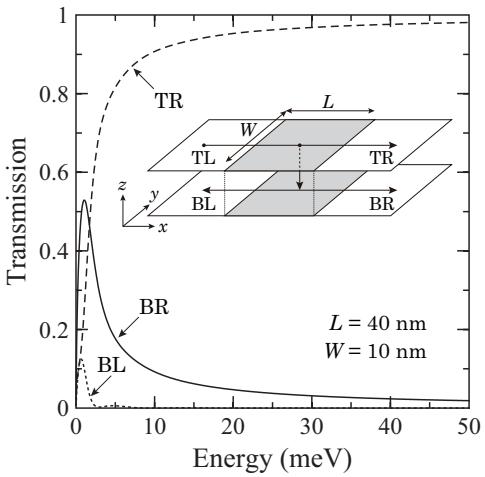
E-mail: {mishima, hashimoto, mori}@si.eei.eng.osaka-u.ac.jp

MoS_2 などの 2 次元 (2D) 材料をトンネル FET (TFET) のチャネルに用いることにより，良好なデバイス特性が得られると期待されている．2D TFET において，トンネル電流は，電子の輸送方向に垂直に流れ，その状況は，初等的な量子力学で扱われるトンネル効果と異なっている．そのため，2D TFET のデバイスシミュレーションに向けて，層間トンネル過程のモデル化が重要である．本研究では，層間トンネル過程のモデル化に向けて，非平衡グリーン関数 (NEGF) 法を用いて，電子の輸送方向とトンネル方向とが垂直な層間トンネル過程を解析した．

図 1 の挿入図に示したデバイスモデルを用いて層間トンネル過程を考察した．無限に長い，幅 W のリボン状 2 次元半導体が 2 枚重なった系を考え，灰色で示した長さ L のチャネル領域のみ，層間トンネルが生じると仮定した．そして，左上の電極 TL から電子を注入した場合の，右上の電極 TR，左下の電極 BL，右下の電極 BR への透過関数を NEGF 法を用いて計算した．

2 次元半導体は有効質量 $m^* = 0.1m_0$ の放物線バンドを持つと仮定し，図 1 の系をメッシュ幅 a の正方格子を用いて離散化した．その際，層間は弱く結合していると仮定し，小さな正値 ϵ を用いて，$t_z = \epsilon t_{xy}$ とした．ここで，t_z は層間移動積分の大きさ，t_{xy} は面内移動積分の大きさである．

図 1 に透過関数の入射エネルギー E 依存性を示す．$W = 10\,\mathrm{nm}$，$L = 40\,\mathrm{nm}$，$\epsilon = 10^{-4}$ とした．エネルギー E は，基底モードの最低エネルギーから測った値であり，輸送方向の運動エネルギーに対応する．初等的な量子力学で扱われるトンネル効果では，入射エネルギーの増加と共に，トンネル確率が増加する．しかし，電極 BR への層間トンネルでは，立ち上がり部分を除き，E の増加と共に，トンネル確率が減少した．これは，入射エネルギーの方向とトンネル方向とが直交しているため，E の増加が，トンネル確率の増加には直接には結びつかないためである．図 2 に透過関数のチャネル長 L 依存性を示す．$W = 10\,\mathrm{nm}$，$E = 25\,\mathrm{meV}$ とした．L が長くなるにつれて電極 BR への層間トンネル確率が増加することが分かった．これは，L の増加とともに，トンネル可能な領域における電子の滞在時間が長くなるためであると考えられる．



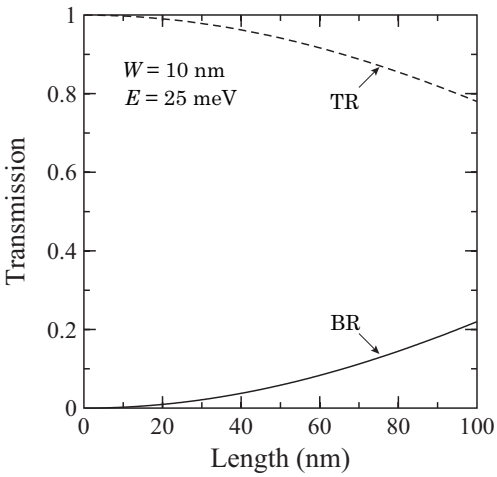


Fig. 1 [left]: Transmission functions as a function of the incident electron kinetic energy. Inset shows a schematic device structure. **Fig. 2** [right]: Transmission functions as a function of the channel length.

© 2018年 応用物理学会