

TMDC ナノリボンにおけるバンド間トンネル電流の NEGF 解析 NEGF analysis of band-to-band tunneling in TMDC nanoribbon

○ 橋本 風渡, 森 伸也 (阪大工)

○ F. Hashimoto and N. Mori (Osaka Univ.)

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

近年、遷移金属ダイカルコゲナイド (TMDC) を用いたトンネルトランジスタが実現されており、優れたデバイス特性を示している [1]。本研究では、強束縛近似 (TB) 法および非平衡グリーン関数 (NEGF) 法を用いて、TMDC ナノリボンにおけるバンド間トンネル電流を解析した。

計算モデルを図 1 に示す。 x 方向に沿ったジグザグ端ナノリボンを仮定し、リボン幅を N と定義した。図 2 に $N = 5$ の MoS_2 ナノリボンのバンド構造を示す。11 バンド TB 法 [2] を用いて求めたバンド構造を第一原理計算で求めたバンド構造にフィッティングし、TB パラメータを抽出した。次に、pn 接合のポテンシャル形状を表現するため、系にエカートポテンシャルを印加した (図 1 青線)。その際、右電極の伝導帯の底を 0eV とし、左電極の価電子帯の頂上を ΔE とした。弾道輸送条件のもと、NEGF 法を用いて左電極から右電極への透過関数 $T(E)$ を計算した。図 3 の実線に $T(E)$ のトンネル距離 l 依存性を示す。入射エネルギーを $E = \Delta E/2$ とし、入射エネルギーにおけるトンネル距離を l と定義した。 l を長くしていくと、透過関数の値は指数関数的に減少していくことがわかった。また、透過しにくいトンネル距離が存在することが分かった (図 3 赤矢印)。図には、トンネル確率の解析モデル $T(E) = (\pi^2/9) \exp(-\pi l \sqrt{m_r E_g}/2\hbar)$ の結果を、換算質量 m_r をパラメータとして、破線でプロットした。換算質量 $m_r = m_0$ のとき、傾きがよく一致した。

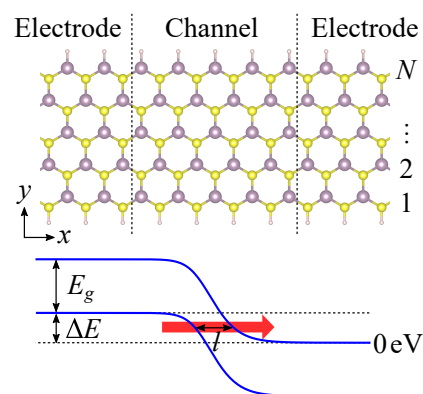


Fig 1: MoS_2 zigzag-edge nanoribbon model and the band profile.

[1] T. Roy *et al.*, Appl. Phys. Lett. **108**, 083111 (2016). [2] E. Ridolfi *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **27**, 365501 (2015).

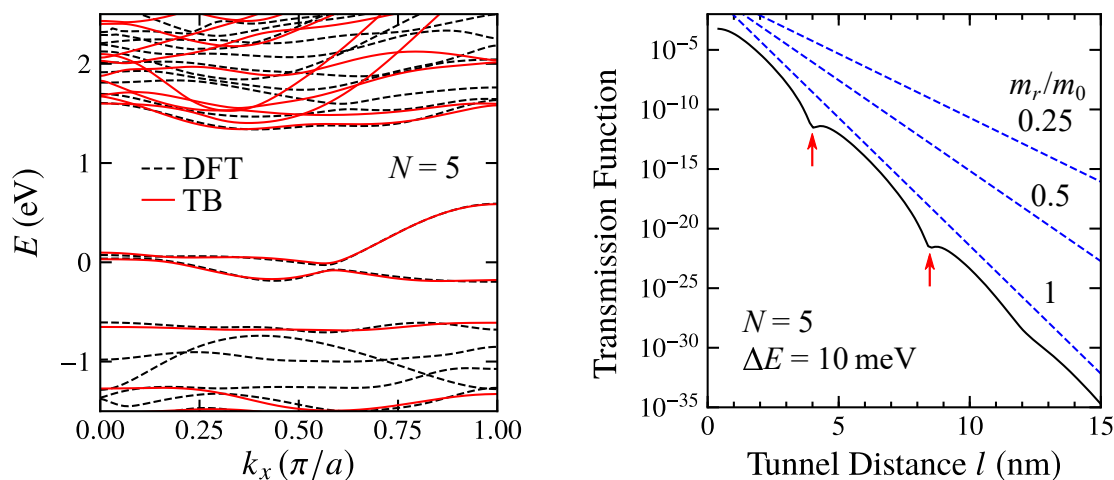


Fig. 2 [left]: Band structures of MoS_2 nanoribbon for $N = 5$ calculated by DFT (dashed line) and TB method (solid line). a is the lattice constant. **Fig. 3** [right]: Tunnel distance dependence of the transmission function at $E = \Delta E/2$ for $N = 5$ and $\Delta E = 10\text{ meV}$.