

3次元デバイス構造のもとでの 単原子層 MoS₂ チャンネルのモンテカルロシミュレーション II

Monte Carlo Simulations of Single-Layer MoS₂ under 3D Device Structures II

筑波大数理 〇(M2)岡田 崇太, (P)吉田 勝尚, 佐野 伸行

Inst. Appl. Phys., Univ. of Tsukuba, °Shuta Okada, Katsuhisa Yoshida, Nobuyuki Sano

E-mail: s1820313@s.tsukuba.ac.jp

【はじめに】単原子層 MoS₂ を用いた FET 構造が次世代デバイスとして注目されている。しかしながら、ソース/ドレイン/ゲートまで含めたデバイス構造に（ナノ構造で顕著となる）クーロン相互作用を高精度に導入した輸送特性解析は未だない。前回、ドリフト拡散法との比較を通して、長距離クーロン・ポテンシャルの自己無撞着モンテカルロ (MC) 法への導入を行った[1]。本報告では、エネルギー保存の観点[2]から MC 法への高精度なクーロン相互作用導入について検討した。

【計算手法】周期境界条件を課した MoS₂ のバルク形状 (100 nm × 150 nm) を想定し、不純物濃度は $6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ とした。ポアソン方程式では、電子を遮蔽長程度の粒子として扱うことで電子間クーロン相互作用の長距離成分のみを反映させた。MC 法では、2次元周期境界条件を課した。フォノン散乱を人為的に外した閉じた系と、フォノン散乱によるエネルギー散逸のある開放系で数値解析を行った。

【結果と考察】本解析では、ポアソン方程式で MoS₂ に現実的な有限の厚さを想定することで、2次元電荷面密度を 3次元電荷密度に換算している。MoS₂ 膜厚を 0.6nm としたときに、自己無撞着 MC 法から求めた、外場のない閉じた系及び開放系でのエネルギーの時間発展を Fig.1 に示す。閉じた系での自己無撞着 MC では、エネルギーが時間とともに急激に増大することがわかる。これは、理想的2次元系の MC 法で無視されている、MoS₂ 膜厚内での急激なポテンシャル変調に伴った影響と考えられる。一方、フォノン散乱を導入してエネルギー散逸のある開放系では、エネルギーが保存されることがわかる。つまり、エネルギー保存が破られてクーロン相互作用の導入が不完全な自己無撞着 MC 法においても、開放系では数値的に安定した結果を導いてしまうことを示唆している。10nm の MoS₂ 膜厚を想定した場合のエネルギーの時間変化を Fig.2 に示す。膜

厚を厚くすることで、エネルギーの増大が抑えられていることがわかる。つまり、自己無撞着 MC 法の計算では 2次元材料の厚さに結果が非常に鋭敏になる。従って、2次元材料に対する高精度な輸送解析では、厚み方向に対するポテンシャル変調の電子輸送への影響を物理的に明らかにする必要がある。

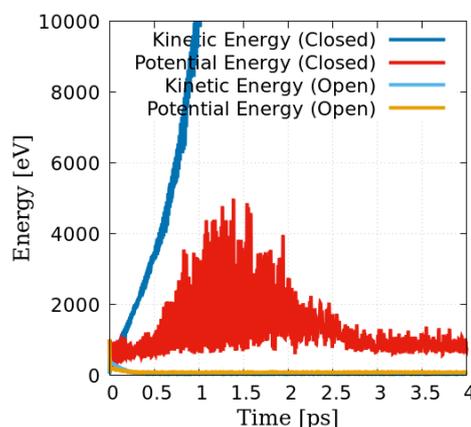


Fig.1: Time evolution of electron's energy. The thickness of MoS₂ is 0.6nm.

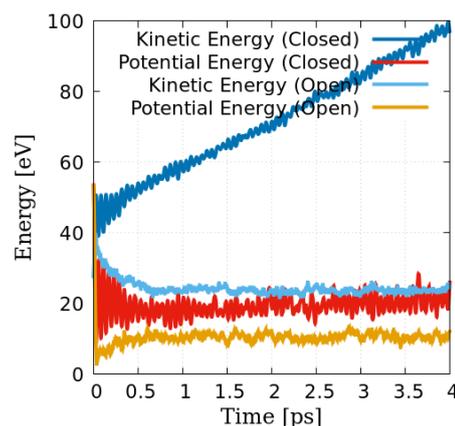


Fig.2: Time evolution of electron's energy. The thickness of MoS₂ is 10nm.

【参考文献】

- [1] 岡田, 吉田, 佐野, 第 80 回応用物理学会秋季学術講演会, 18p-E303-4 (2019).
[2] T. Fukui, T. Uechi, N. Sano, Appl. Phys. Express **1**, 051407_1-3 (2008).