

様々な方位および断面サイズを有する 長方形断面 GeSn ナノワイヤの電子状態解析

Electronic state analysis of rectangular cross-sectional GeSn nanowires
with various orientations and cross-sectional sizes

京大院工¹, 阪大院工² ○佐藤瑞起¹, 田中一^{1,2}, 木本恒暢¹
Kyoto Univ.¹, Osaka Univ.², ○M. Sato¹, H. Tanaka^{1,2}, and T. Kimoto¹

E-mail: msato@semicon.kuee.kyoto-u.ac.jp

MOSFET の微細化に伴う短チャネル効果を抑制できるデバイスとして, ナノワイヤ (NW) FET に注目が集まり研究が行われてきた. NWFET の動作特性を把握するためには, チャンネルとなる NW の電子状態の理解が必須となる. NW の材料として, Ge と Sn の混晶で移動度の高い GeSn は有力候補の一つであるが, GeSn NW の電子状態についての系統的な理解は不十分である.

本研究では, 仮想結晶近似を用いた $sp^3d^5s^*$ tight-binding (TB) 法[1,2]により, 一辺の長さが 2 nm から 10 nm の長方形断面を持つ GeSn NW のバンド構造および波動関数を計算し, 結晶方位, 断面形状および Ge と Sn の組成比等のパラメータが電子状態に与える影響を調べた. 本研究において計算した NW の方位および側壁面は, [001]/(100)/(010), [001]/(110)/(1 $\bar{1}$ 0), [110]/(001)/(1 $\bar{1}$ 0), [111]/(11 $\bar{2}$)/(1 $\bar{1}$ 0) の四種類である. また, バルク GeSn および GeSn NW の波動関数に対する各原子軌道成分の寄与割合を計算した.

図 1 に Sn の組成比を 0.25 としたバルク GeSn の伝導帯構造を示す. 図 1 より, バルク GeSn は三つの伝導帯谷を持つことが分かる. また, それぞれの谷に対する s 軌道の寄与割合が異なり, その大きさは Γ 谷 $>$ L 谷 $>$ Δ 谷となっている. これらを踏まえて GeSn NW について考察する. 図 2 に, 約 10 nm $\times$ 3 nm の長方形断面をもち, Sn の組成比が (a) 0.1875 および (b) 0.625 である [110]/(001) GeSn NW の Γ 点付近における伝導帯構造を示す. また各固有エネルギーに対する s 軌道の寄与割合(P_s)をカラーマップで示している. 一般的に NW の伝導帯谷は, バルク伝導帯谷の等エネルギー面の射影により理解される. 図 2 において, NW のサブバンドにおける P_s をバルクのものと比較することで, P_s が大きく青色に近いサブバンドは Γ 谷由来, P_s が小さく赤色のサブバンドは Δ 谷由来, P_s が中間の値である黄緑色に近いサブバンドが L 谷由来であると推定できる. このように, サブバンドの軌道成分を計算することにより, NW の伝導帯の由来について視覚的に考察することができる. また, Sn の組成比が増加するにつれて, Γ 点における伝導帯底のサブバンドが L 点由来のサブバンドから Γ 点由来のサブバンドに変化していることが分かる. そこで, 伝導帯底のエネルギーの Sn 組成依存性について調べた. 図 3 に, 断面サイズが約 10 nm $\times$ 3 nm の [001]/(110) GeSn NW および同断面サイズの [110]/(001) GeSn NW の Γ 点での伝導帯底エネルギーについて, Sn 組成依存性を示す. [110]/(001) GeSn NW について, Sn の組成比が 0.14 となる付近から Γ 谷底のエネルギーの傾向が変化していることが分かる. また, [001]/(110) GeSn NW についても同様に Sn 組成 0.06 付近から傾向が変化している. これらの, 伝導帯底エネルギーの傾向が変化している Sn 組成で, NW の Γ 谷底となるサブバンドが別のバルクバンドを由来とするサブバンドに入れ替わっていると考えられる. これらを踏まえて, 当日は輸送特性に大きく影響する有効質量についても議論する.

[1] T. B. Boykin *et al.*, *Phys. Rev. B*, **66** (2002) 125207.

[2] A. Paul *et al.*, *IEEE Electron Device Lett.*, **31** (2010) 278.

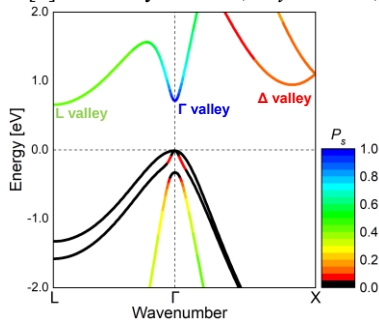


Fig. 1: The calculated band structure of bulk $\text{Ge}_{0.75}\text{Sn}_{0.25}$ and the corresponding contribution ratio of s orbitals (P_s). As the s -orbital contribution increases, the color approaches blue.

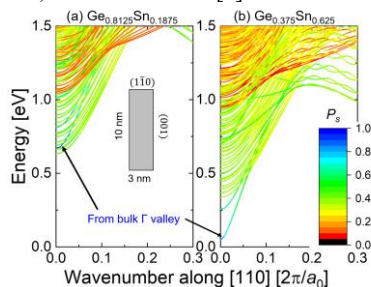


Fig. 2: The calculated conduction band structures of [110] (a) $\text{Ge}_{0.8175}\text{Sn}_{0.1825}$ and (b) $\text{Ge}_{0.375}\text{Sn}_{0.625}$ NWs with about 10 nm $\times$ 3 nm cross sections. The corresponding contribution ratio of s orbitals (P_s) is indicated.

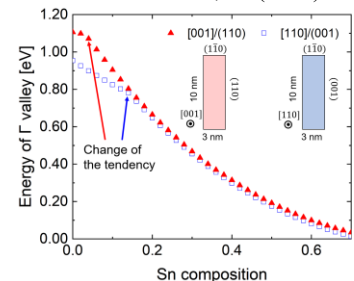


Fig. 3: The Sn composition ratio dependence of the energy of the conduction band minimum (CBM) at the Γ point in rectangular [001]/(110) and [110]/(001) GeSn NWs with about 10 nm $\times$ 3 nm cross sections.