

等価モデルに基づく半導体ナノワイヤバンド間トンネルシミュレーション

Equivalent Model Based Band-to-band Tunneling Simulation of Semiconductor Nanowires

阪大院工 ○岡田 丈, 森 伸也

Osaka Univ., ○Jo Okada, Nobuya Mori

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

量子輸送シミュレーションの高速化に向けてハミルトニアンサイズ縮小が重要である．等価モデル (EM) [1] では，輸送窓と呼ばれる狭いエネルギー範囲に含まれる伝搬状態を抽出し，小さな基底系を構築することにより，ハミルトニアンサイズを縮小する．しかし，バンド間トンネルでは，禁止帯中の減衰状態が重要な役割を演じるため，減衰状態を陽には含まない等価モデルにより，バンド間トンネルを高精度に表現できるかは自明ではない．さらに，輸送窓幅と計算精度の関係も不明である．そこで，本研究では，等価モデルに基づきバンド間トンネル確率を計算し，原子論モデルに基づく結果と比較し，等価モデルのバンド間トンネル確率計算精度を評価した．

Fig. 1 に示したような半導体ナノワイヤにおけるバンド間トンネル確率 T を非平衡グリーン関数法を用いて計算した． $sp^3d^5s^*$ 強結合近似モデル (TBM) を用いた原子論モデル (Fig. 1(a)) の結果 T_{TBM} と，EM (Fig. 1(b)) の結果 T_{EM} とを比較した．Fig. 2 に一辺 1.35 nm の正方形断面の Si ナノワイヤのバンド構造を示す．右側のパネルが伝搬状態の $E-k$ 関係，左側のパネルが減衰状態の $E-\kappa$ 関係を表す．黒実線は TBM，赤破線は EM の結果である．EM の輸送窓幅 E_w をナノワイヤの禁止帯幅 E_g の 2 倍に設定した場合の結果である．EM が伝搬状態のみならず，減衰状態も正確に表現できていることがわかる．さらに， E_w を増加させると， κ が大きい部分の分散関係も正確に表現できることがわかった．Fig. 3 に，種々の材料における，EM のバンド間トンネル確率計算誤差 $|T_{EM} - T_{TBM}|/T_{TBM}$ の E_w/E_g 依存性を示す．バンド間トンネル確率は，Fig. 3 の挿入図に示したようなポテンシャルをナノワイヤに印加して計算した．計算誤差は E_w の増加とともに指数関数的に減少することがわかった．また， E_w/E_g を固定した場合，直接遷移半導体 (GaAs, InSb) の方が，間接遷移半導体 (Si, AlP) より，高精度な結果が得られることもわかった．

[1] G. Mil'nikov, N. Mori, and Y. Kamakura, Phys. Rev. B **85**, 035317 (2012).

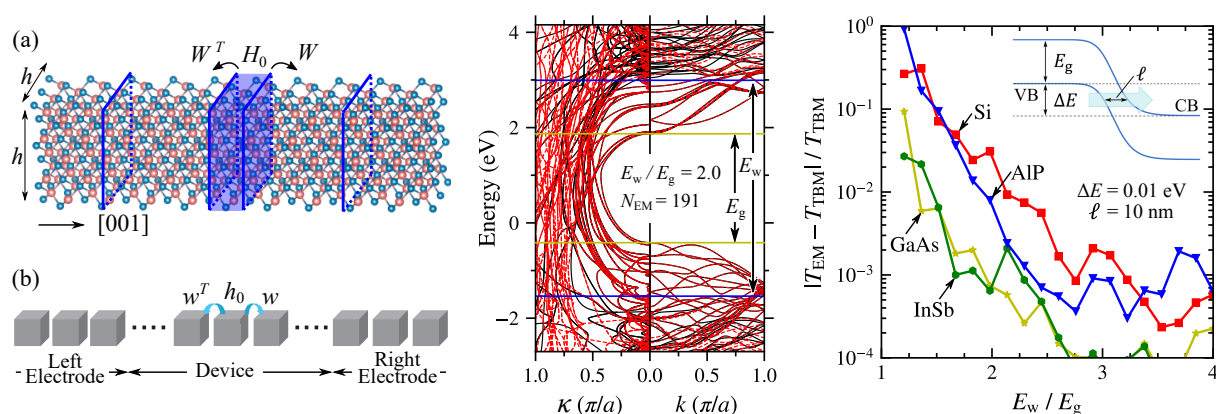


Fig. 1 [left] Schematic diagram of a $\langle 100 \rangle$ semiconductor nanowire. (a) Tight-binding model (TBM) and (b) equivalent model (EM) representation. **Fig. 2** [center] Band structure of a 1.35 nm $\times$ 1.35 nm Si nanowire calculated with TBM (black solid line) and EM (red dashed line). **Fig. 3** [right] Relative error of the tunneling probability $|T_{EM} - T_{TBM}|/T_{TBM}$ as a function of E_w/E_g . Inset shows the potential profile.