

歪シリコンナノシートにおける有効質量変化に関する第一原理計算

First-Principles Calculation of Electron Effective Mass in Strained Silicon Nanosheet

産総研¹ ○(P) 堀井 耀¹, 植田 暁子¹, 林 喜宏¹

National Institute of Advanced Industrial Science and Technology¹,

○Hikaru Horii¹, Akiko Ueda¹, Yoshihiro Hayashi¹

E-mail: hikaru.horii@aist.go.jp

シリコンの電気伝導性を向上させる手段として、シリコンゲルマニウム基板との格子不整合性等を利用した“歪みエンジニアリング”がある[1]。これは、歪みによるシリコン中の電子の有効質量の減少と緩和時間の増大によることが理論的に示されている [1,2]。しかしながら、ナノシートのようにシリコン膜厚が極めて薄くなったときの歪みに対する有効質量や電気伝導特性への影響は明らかにされていない。

そこで我々は、図 1 に示すように(110̄)面を水素終端して有限サイズとした 2 次元のスラブモデルを構築し、密度汎関数理論に基づく第一原理計算によって、歪みを加えたシリコンナノシート (1.96 nm~7.75 nm 厚) の電子状態を計算した。本研究では、(110)面に対して引張応力を印加した際に支配的になる GX 間のバレーの[110]方向 (電気伝導方向) の有効質量を計算した。

その結果、先行研究[3,4]と同様に、[110]方向の有効質量はある程度までの応力の増大に対して、膜厚に依らず減少傾向を示した。一方で、応力をさらに増加させると、その有効質量はある閾値応力にて増加に転じることが明らかとなった。この変化は、応力印加によって GX 間のバレーが Γ 点側にシフトすることに起因しており、閾値応力はバレー位置が Γ 点になるときの応力に対応する。また、ナノシートの薄膜化に伴って、有効質量の値は全体として減少し、有効質量の極小値を与える応力は減少方向にシフトすることがわかった。当日は、有効質量の振舞いに関する物理モデルについても報告する。

この成果は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の助成事業(JPNP20017)の結果得られたものです。

[1] S. Takagi, *et al.*, J.Appl. Phys. **80**, 1567 (1996). [2] S. Richard, *et al.*, J. Appl. Phys. **94**, 5088 (2003).

[3] K. Uchida, *et al.*, IEDM Tech. Dig., 135 (2005).

[4] T. Maegawa, *et al.*, IEEE Trans. Electron Devices **56**, 553 (2009).

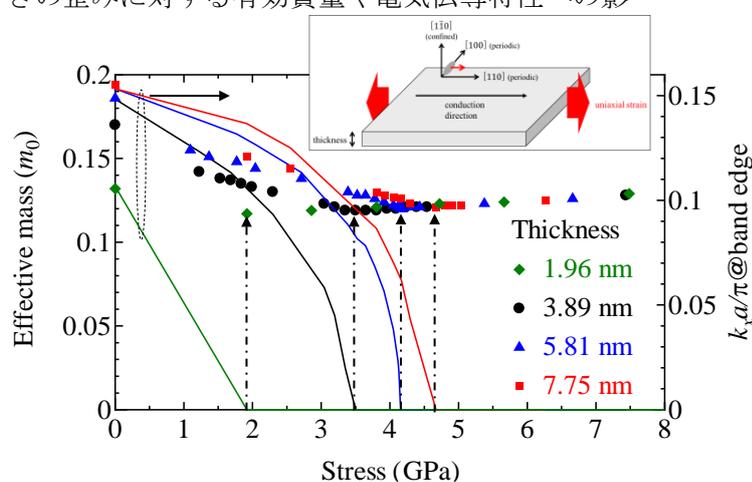


Fig. 1: Effective masses of electrons at the conduction-band valley between Γ and X points along [110] in Si nanosheets for various thicknesses (left axis) and corresponding wave numbers (right axis) as a function of [110] stress. Schematic illustration of the simulation model is shown in the inset.