

直接遷移型半導体におけるバンド間トンネルシミュレーションの高速化 Speeding Up Band-to-band Tunneling Simulation of Direct-Gap Semiconductors

阪大院工 ○(B) 岡田 丈, 橋本 風渡, 森 伸也

Osaka Univ., ○Jo Okada, Futo Hashimoto, Nobuya Mori

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

量子輸送デバイスシミュレーションの高速化にむけて電子状態を記述するハミルトニアンをのサイズを圧縮する手法の開発が重要である [1]。我々は、目標とする系の輸送エネルギー窓内にある実バンド構造を再現する、小さな等価ハミルトニアンを、適応モーメント推定を用いて決定するシステムを構築した [2, 3]。本研究では、トンネルトランジスタの量子輸送シミュレーションへの応用を目指し、実バンド構造だけでなく、複素バンド構造も再現する等価モデルを構築した。そして、構築した等価モデルを用いて、直接遷移型半導体ナノワイヤにおけるバンド間トンネル確率を計算し、等価モデルの性能評価を行った。

Fig. 1(a) に示したような閃亜鉛鉱直接遷移型半導体ナノワイヤにおけるバンド間トンネル確率について考察した。等価モデルでは、Fig. 1(b) に模式的に示したように、系を擬 1 次元鎖モデルで表現する [2, 3]。等価モデルのパラメータ行列 D, S は、系の実および複素バンド構造を再現するよう適応モーメント推定を用いて決定した。Fig. 2 の実線に、一辺 1.41 nm の正方形断面の GaAs ナノワイヤのバンド構造を示す。sp³d⁵s* 強結合近似モデル (TBM) を用いて計算した結果であり、ハミルトニアン行列のサイズは 150 × 150 である。このバンド構造を再現するよう構築した等価モデル (EM) に基づくバンド構造を Fig. 2 の破線に示す。EM ハミルトニアン行列のサイズは 12 × 12 である。輸送窓内における実バンド (右パネル, E - k 関係) および複素バンド (左パネル, E - κ 関係) がよく一致することがわかる。つぎに、非平衡グリーン関数法を用いて、バンド間トンネル確率を計算した。その際、Fig. 3 の挿入図に示したエカートポテンシャル ($\Delta E = 0.15$ eV) を系に導入した。Fig. 3 に、バンド間トンネル確率のトンネル距離依存性を示す。図には、InAs ナノワイヤの結果もあわせてプロットした。TBM (実線) と EM の結果 (点線) とがよく一致することを確認した。

[1] G. Mil'nikov, N. Mori, and Y. Kamakura, PRB **85**, 035317 (2012). [2] 岡田 森 2020 年 応物春季講演会 12p-A202-8. [3] J. Okada, F. Hashimoto, and N. Mori, JJAP, DOI: 10.35848/1347-4065/abd6df.

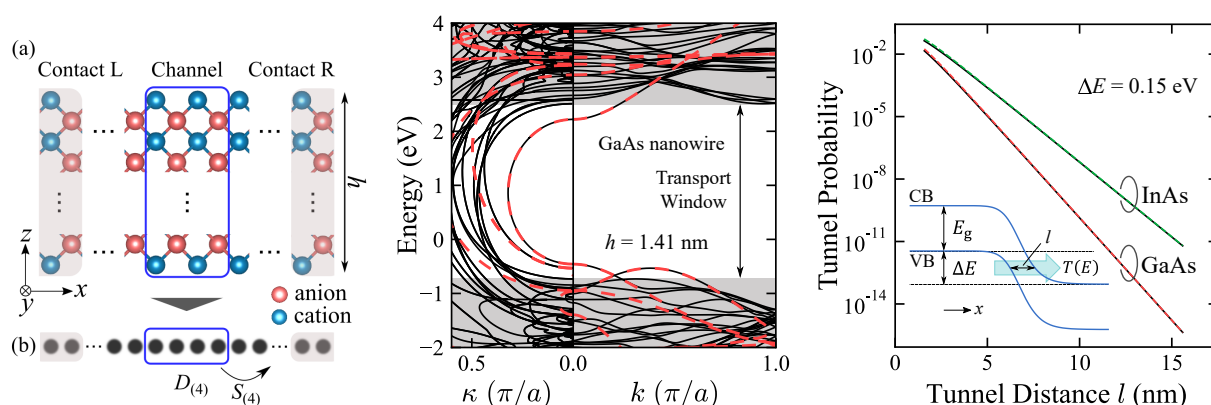


Fig. 1 [left] Schematic diagram of a <100> wurtzite semiconductor nanowire. (a) Tight-binding approximation model (TBM) and (b) equivalent model (EM) representation. **Fig. 2** [center] Band structure of a 1.41 nm × 1.41 nm GaAs nanowire calculated with TBM (solid line) and with EM (dashed line). **Fig. 3** [right] Tunneling probability vs. tunneling distance calculated with TBM (solid line) and with EM (dotted line). Inset shows the potential profile.