

半導体ナノシートにおける電子移動度の結晶方位依存性の モンテカルロシミュレーション

Monte Carlo Simulation of Crystallographic Orientation Dependence of Electron Mobility in Semiconductor Nanosheets

阪大院工 ○岡田 丈, 田中 一, 森 伸也

Osaka Univ., ○Jo Okada, Hajime Tanaka, Nobuya Mori

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

モンテカルロ (MC) 法を用いた半導体ナノシート (NS) の電子輸送特性解析では, サブバンド構造・散乱確率を計算し, その結果を用いて, 自由走行・散乱過程を模擬する. その際, 通常, 自由走行時にサブバンド指数は変化しないと仮定する. しかし, 有効質量の非対角成分 (ODEM) が有限の値を持つ場合, ODEM 誘起サブバンド間遷移のため, この仮定が成り立たない [1]. そのため, 任意の結晶方位を持つ NS の電子輸送特性を解析する場合には注意が必要である. 本研究では, ODEM 誘起サブバンド間遷移が NS の電子移動度に与える影響を MC 法を用いて調べた.

Fig. 1 に示したような, $(0\bar{1}1)$ 面上の, $[\bar{2}11]$ チャネルの n-Si NS を考えた. x 方向を輸送方向とし, y 方向, z 方向の閉じ込め幅をそれぞれ, W_y , W_z とした. $[100]$ 谷の電子を考慮し, 無限井戸形ポテンシャルを仮定した. Fig. 2 の黒点線にサブバンド構造 $E_n(k)$ を示す. ODEM 誘起サブバンド間遷移の影響を調べるため, Krieger-Iafrate (KI) 方程式 [2] を用いて, 電子の存在確率 $|a_n(k(t))|^2$ の時間発展を調べた. 初期値として $|a_1(k(0))|^2 = 1$, $k(0) = 0$ を与え, $|a_n(k(t))|^2$ を数値計算により求めた後, 平均的なエネルギー $\bar{E}(k(t)) = \sum_n |a_n(k(t))|^2 E_n(k(t))$ を計算した. 結果を Fig. 2 の実線に示す. 自由走行中に基底サブバンドの電子の存在確率が減少し, 励起サブバンドの電子の存在確率が増加していることがわかる. 次に, MC 法を用いて, 電子移動度を計算した. 自由走行時に KI 方程式を解くことで, 電子の存在確率 $|a_n(k(t))|^2$ を計算し, サブバンド間遷移を取り入れた [3]. Fig. 3 にサブバンド間遷移を考慮した場合の結果を赤印で, 考慮しなかった場合の結果を黒印で示す. W_y が小さい場合, 両者は一致しているが, W_y が大きくなるにつれて, サブバンド間遷移を考慮した場合のほうが移動度が高くなることがわかった.

[1] N. Mori *et al*, submitted for publication. [2] J. B. Krieger and G.J. Iafrate, Phys. Rev. B, **33**, 5494 (1986). [3] R. Hathwar *et al*, J. Appl. Phys. **120**, 044307 (2016).

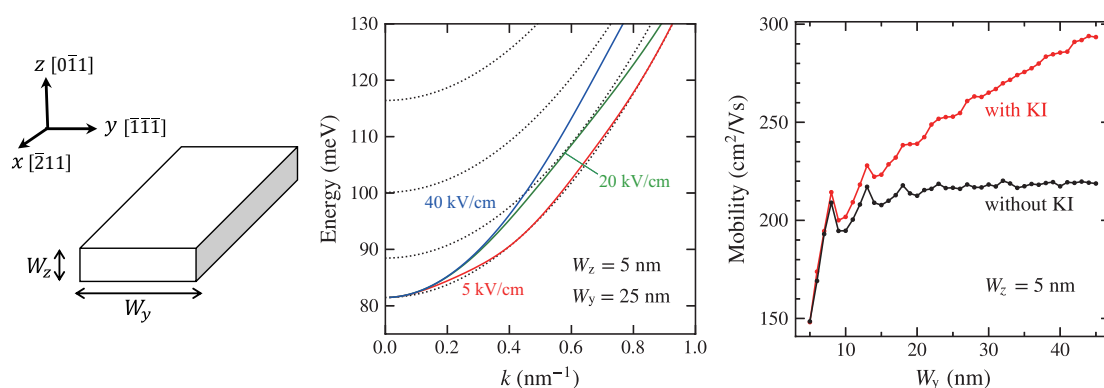


Fig. 1 [left] Schematic diagram of n-Si nanosheet. **Fig. 2** [center] Subband structure of the n-Si nanosheet (dotted lines). Solid lines represent $\bar{E}(k(t))$ for $F = 5, 20, 40$ kV/cm. **Fig. 3** [right] Mobility as a function of W_z with (without) the ODEM-induced subband transitions shown by the red (black) marks.