

第一原理計算によるシリコンナノワイヤの電子構造解析

Electronic Structure Analysis of Silicon Nanowires by First Principle Calculation

東工大総理工¹, 東工大フロンティア研², 筑波大理³ °李 映勲¹, 永田 貴弘³, 白石 賢二³, 角嶋 邦之¹, 岩井 洋²
IGSSE, Tokyo Tech.¹, FRC, Tokyo Tech.², Graduate School of Pure and Applied Sciences, Univ. of Tsukuba³
°Yeonghun Lee¹, Takahiro Nagata³, Kenji Shiraishi³, Kuniyuki Kakushima¹, Hiroshi Iwai²
E-mail: lee.y.ac@m.titech.ac.jp

トランジスタ微細化の限界が提言され、次世代トランジスタとして、シリコンナノワイヤ FET が注目されている。シリコンはナノサイズの構造になると、量子閉じ込め効果により電子構造が変わることが知られている。本研究では、シリコンナノワイヤの電子構造を第一原理計算により解析を行った。モデルは正四角形の断面を持った[001]方向に無限に長いワイヤであり、表面のダングリングボンドは水素で終端した。その結果、ワイヤ断面の一边の長さ(SL)が約 7.7Å 場合、バンドギャップは約 3 eV となり、直接遷移型となった(図 1)。量子チャンネル数は伝導帯下端(CBM)と価電子帯上端(VBM)付近 0.05eV 以内にある各々のサブバンドの数を数えた値で、多いほどキャリアが多く存在できる。ホール伝導に影響を与える VBM 付近の量子チャンネル数は SL が大きくなるにつれて多くなる傾向があるが、SL が約 4 nm 以下のナノワイヤでは、電子伝導に影響を与える CBM 付近の量子チャンネル数の変化はない(図 2)。講演では、バンドギャップと量子チャンネル数の SL 依存性、電子とホールの有効質量の SL 依存性、さらには、キャリア伝導についても議論を行う予定である。本研究は経済産業省「ナノエレクトロニクス半導体新素材・新構造デバイス技術開発」の支援を受けた。

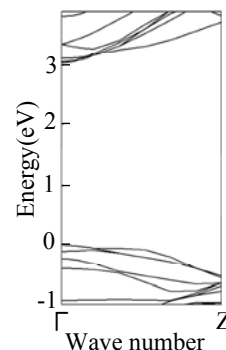


図 1. 7.7Å の SL を持つワイヤのバンド図

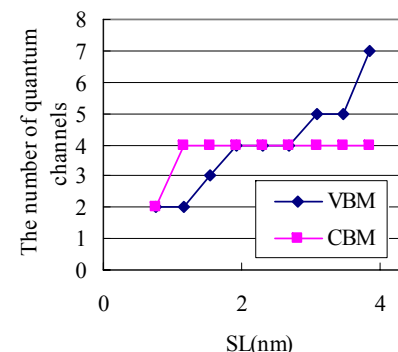


図 2. 量子チャンネルの SL 依存性