社団法人 電子情報通信学会 THE INSTITUTE OF ELECTRONICS, INFORMATION AND COMMUNICATION ENGINEERS

信学技報 IEICE Technical Report SDM2011-146(2011-12)

# 長方形断面 Si ナノワイヤの伝導帯構造の断面形状およびサイズ依存性

森 誠語 森岡 直也 須田 淳 木本恒暢

京都大学工学研究科電子工学専攻 〒615-8510 京都府京都市西京区京都大学桂

E-mail: {mori, morioka}@semicon.kuee.kyoto-u.ac.jp, {suda, kimoto}@kuee.kyoto-u.ac.jp

**あらまし** 強束縛近似法を用いて,長方形断面を有する[001]および[110]Si ナノワイヤの伝導帯構造を計算し,断 面形状の違いによるバンド構造の変化を検討した. バルク Si のフルバンド分散との比較解析により,一辺が 4 nm 以上の断面をもつナノワイヤのサブバンド構造を,バルク Si 伝導帯の非放物線性に基づいて定量的に説明できた. また,両辺が 3 nm 以下の断面を有する[110]方向のナノワイヤでは,縮退した谷の分裂によって有効質量が減少し, この効果は断面形状に大きく依存することを見出した. このようなサイズの[110]ナノワイヤを n チャネルとして用 いることで, MOSFET の性能向上が期待できる.

キーワード Si ナノワイヤ, 強束縛近似法, 伝導帯, 非放物線性, 有効質量, 谷分裂

## Shape and Size Effects on Conduction Band Structure

## of Si Nanowires with Rectangular Cross Section

Seigo MORI Naoya MORIOKA Jun SUDA and Tsunenobu KIMOTO

Department of Electronic Science and Engineering, Kyoto University

Kyotodaigaku-katsura, Nishikyo, Kyoto, 615-8510 Japan

E-mail: {mori, morioka}@semicon.kuee.kyoto-u.ac.jp, {suda, kimoto}@kuee.kyoto-u.ac.jp

**Abstract** We calculated the conduction band structures of [001]- and [110]-oriented Si nanowires with rectangular cross section using a tight-binding approximation and investigated the dependence of the band structures on those cross-sectional shapes. By comparing them with the full-band distribution of bulk Si, the subband structures of Si nanowires with the width over 4 nm can be quantitatively explained by nonparabolicity of the conduction band of bulk Si. In addition, the effective mass of very narrow (< 3 nm) [110] nanowires is decreased by a valley splitting and it depends on the cross sectional shapes of the nanowires. It is expected that n-MOSFETs with such nanowires have superior characteristics.

Keyword Si Nanowire, Tight-Binding Approximation, Conduction Band, Nonparabolicity, Effective Mass, Valley Splitting

#### 1. 背景

近年のCMOS集積回路における素子の微細化に伴い, MOSFETの短チャネル効果によるリーク電流の影響が 無視できなくなってきている.このため,今後 CMOS デバイスのさらなる性能向上を実現するためには,従 来のプレーナ型 MOSFET とは異なる構造が必要であ る.中でも Si ナノワイヤをチャネルとして用いる MOSFET[1,2]は、マルチゲート化とチャネル領域の完 全空乏化によりゲートの高い静電制御性が期待できる ため,次世代 CMOSデバイスとして注目を集めている.

Si ナノワイヤ MOSFET の動作特性を評価するため には、チャネル内でのキャリアの振る舞いを理解する ことが重要である.そのためには、Siナノワイヤのバ ンド構造を知る必要があり、これまで数値計算による 多くの研究が行われてきた[3-6].これらの報告の多く は、正方形や円形のような単純な断面構造を仮定して 計算を行っているが、実際に作製されているナノワイ ヤの断面形状は、長方形に近い形が多い.しかしなが ら、長方形断面を有する Si ナノワイヤのバンド構造に ついて、その幅依存性を検討した報告は非常に少なく [5]、さらなる検討が必要であるといえる.

そこで本研究では、長方形断面を有する Si ナノワイ ヤの伝導帯に着目し、強束縛近似法によるバンド計算 を行った.特に MOSFET の特性を決定づける移動度 (長チャネルの場合)あるいは注入速度(電子のバリ スティック伝導が可能な短チャネルの場合)の両方に 関わる重要なファクターである有効質量について、ナ ノワイヤの幅に対する依存性を検討した.この際、有 効質量近似と共に、バルク Si の伝導帯の非放物線性を 考慮した手法[6]との比較解析を行うことで、Si ナノワ

NCopyright @2013 by BEICE Service

イヤのサブバンド構造の起源の解明を行った.その上で, n チャネル MOSFET への応用上有利であると考えられる構造の検討を行った.

### 2. 計算方法

### 2.1. バンド構造の計算

伝導帯構造の計算には、最近接  $sp^3 d^3 s^3$ 強束縛(TB) 近似法[7]を取り入れた自作プログラムを用いた[8].こ の方法では、基底となる波動関数として、Siの s 軌道, 3 つの p 軌道, 5 つの d 軌道, そして励起状態の s 軌道 に対応する  $s^3$  軌道の計 10 個を考えている.使用した パラメータはバルク Si のバンド構造にフィッティン グされた値を採用し[9], Si 結晶の格子定数として、室 温でのバルクの値  $a_0 = 0.5431$  nm を用いた[10].また, 結晶表面のダングリングボンドは、対応する  $sp^3$  混成 軌道のエネルギーを引き上げることで失活化した[11].

バルク Si の伝導帯における有効質量の実験値は、電子の静止質量を $m_0$ として、縦有効質量 $m_1 = 0.916m_0$ 、 横有効質量 $m_t = 0.191m_0$ であるが[10]、TB 法で計算す ると、 $m_1 = 0.891m_0$ 、 $m_t = 0.201m_0$ であった.この違い は使用したパラメータによる誤差であり、本計算では、 後者の値を用いることにする.また以下では、バルク Si の伝導帯のエネルギー最小値をエネルギーの基準と している.

#### 2.2. 計算に用いた結晶構造

本計算では、[001]および[110]の方位を有する Si ナ ノワイヤについて計算を行った.ナノワイヤ断面の結 晶構造は図 1 のようになっており、それぞれ側面とし て(010)/(100)、(110)/(001)を有する.

## 3. Si ナノワイヤ伝導帯におけるサブバンド構 造の解析手法

TB 法によるバンド構造の計算結果を解析する上で, 以下の 2 つの方法を考える.

Siナノワイヤにおける電子の量子閉じ込め状態を解 析するための簡便な手法として,有効質量近似(EMA)



図 1: ナノワイヤの断面における結晶構造. (a) [001]ナノワイヤ. (b) [110]ナノワイヤ.

がよく用いられる[11]. EMA は,周期的な格子ポテン シャルの影響を有効質量で表し,この有効質量を用い て書き直したシュレディンガー方程式(有効質量方程 式)を解くことで電子状態を計算する方法である.バ ルク Siの伝導帯の底付近での等エネルギー面は図2の ように 6 つの等価な回転楕円体で表される.図中の V<sub>1</sub> 付近でのバルク Si のエネルギー-波数(*E-k*)分散は次 式のようになる.

$$E = \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{\left(k_{[100]} - k_{\Delta}\right)^2}{m_{\rm l}} + \frac{k_{[010]}^2}{m_{\rm t}} + \frac{k_{[001]}^2}{m_{\rm t}} \right]$$
(1)

ここで $\hbar$ はプランク定数/2 $\pi$ ,  $k_{\Delta}$ は伝導帯でエネルギー 最小値をとる波数である.量子構造における *E-k* 分散 は、図 3 のように、閉じ込め方向の波数を定在波の波 数によって離散化することで得られる.したがって、 [100]および[010]方向の幅がそれぞれ  $w_{[100]}$ ,  $w_{[010]}$ であ る、[001]方向のナノワイヤを考えると、 $k_{[100]} - k_{\Delta} =$  $n_{[100]}\pi/w_{[100]}$ ,  $k_{[010]} = n_{[010]}\pi/w_{[010]}$  ( $n_{[100]}$ ,  $n_{[010]} = 1, 2, \cdots$ ) とすることで  $V_1$ 起因の分散関係が得られ、次のように なる.

$$E = \frac{\hbar^2 k_{[001]}^2}{2m_t} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2} \left[ \frac{n_{[100]}^2}{m_t w_{[100]}^2} + \frac{n_{[010]}^2}{m_t w_{[010]}^2} \right]$$
(2)

これを V<sub>1</sub>以外の谷に対しても行うことで,[001]ナノ ワイヤの *E-k* 分散関係が得られる.[110]ナノワイヤに ついても,波数空間の座標変換を用いることで同様の 解析が行える.

EMA はバルク Si のバンドを放物線で近似している が,一般的に波数がバンドの底から離れるほど E-k 曲 線が放物線からずれるため,図 3(a)から,幅の小さい 構造(数 nm オーダー)では誤差が大きいと考えられ る.今回用いる方法では,図 3(a)におけるバルク Si の E-k分散を,放物線で近似するのではなく,TB 法で計 算したフルバンド分散を用いることを考える(この方



図 2: バルク Siの第1ブリュアンゾーンにおける伝導帯底付 近の等エネルギー面.

NII-Electronic Library Service



図 3: 電子の量子閉じ込めによってサブバンドができる様子.(a) 閉じ込め方向の波数に着目したときのバルクの E-k 分散. (b) 幅 wの量子井戸に閉じ込められた電子の波動関数.(c) 量子閉じ込めによって得られるサブバンド構造.(b)から得られた 定在波の波数によって(a)の波数を離散化する.それぞれの波数におけるエネルギーが(c)のサブバンドのエネルギーシフトに 対応し,このとき,輸送方向の波数に注目したバルクの E-k 分散がそのまま量子構造の E-k 分散になる.

法を BD とする). これにより, バンドの非放物線性の 影響を取り入れることができ, ナノワイヤのサブバン ド構造が EMA よりも正確に求まる. BD は, EMA と 同じく, 閉じ込め方向にも周期的な格子ポテンシャル を仮定しているため, 周期性が崩れるような幅の小さ な構造では, 実際の値との誤差が大きくなると思われ る.

以上をまとめると、TBを用いるとSiナノワイヤの 正確なバンド構造が計算でき、EMAは簡便だが誤差が 大きく、BDはTBほどの精度はないが、バルクSiの バンドの非放物線性を考慮することでEMAよりも正 確なサブバンド構造が得られる.

## 4. [001]ナノワイヤの伝導帯構造の計算結果

[001]方向のSiナノワイヤの伝導帯構造を図4に示 す.図4では、谷が2か所にできることが確認でき、 いずれの断面サイズにおいても「点で最低エネルギー をとる.この「点の谷(「谷)は図2のV<sub>1</sub>,V<sub>2</sub>,V<sub>3</sub>, V<sub>4</sub>が投影されてできたものであり、もう一方の谷(off-「谷)は、V<sub>5</sub>によって構成される(V<sub>6</sub>起因の谷は、波 数が負の領域に存在するため、図4では示されていな い).長方形断面では「谷はV<sub>1</sub>とV<sub>2</sub>,V<sub>3</sub>とV<sub>4</sub>によっ てそれぞれ2重に縮退しており、特に正方形断面とな る図4(a)と(c)ではこれらが重なって4重に縮退するこ とが確認できた.また、off-「谷は縮退していない. 「谷と off-「谷のエネルギー差に着目すると、アスペ クト比の大きい図4(b)で大きくなっていることがわか った.このエネルギー差が小さいと、有効質量の大き な off-「谷の影響を強く受けるので好ましくない.

そこで、 Γ谷を基準にしたときの、 Γ谷と off-Γ谷 のエネルギー差の幅依存性を図 5 に示す. 図 5 は[010] 方向の幅が 2.0 nm と 4.2 nm に固定して[100]方向の幅 を変化させたものである. TB 法による結果と共に、前 節で考えた BD と EMA の結果を同時に示している. TB 法による結果から,断面が正方形になるときにエネ ルギー差が最小となることがわかる.BD でもこのこ とが読み取れるが,EMA では極小値をとらないことか ら,バンドの非放物線性の影響を受けていることが確 認できた.[010]方向の幅が 2.0 nm のときに TB と BD の誤差が大きくなっているのは,閉じ込め方向の波動 関数をブロッホ関数で表すことができないことが原因 であると考えられる.また EMA では,[010]方向の幅 が 4.2 nm のときでも TB との誤差が大きいが,BD で は非常にいい一致をみせている.

次に,電子の伝導有効質量の幅依存性を図6に示す. EMA では有効質量はバルクの値と同じ 0.20m<sub>0</sub>で一定 である. [010]方向の幅を 2.0 nm としたときの有効質



図 4: 強束縛近似法を用いて計算した Si[001]ナノワイヤの 伝導帯構造. ナノワイヤの断面サイズは, (a) 2.0 nm×2.0 nm, (b) 2.0 nm×6.0 nm, (c) 6.0 nm×6.0 nm である.



図 5: Si[001]ナノワイヤについて, [010]方向の幅を 2.0 nm と 4.2 nm に固定して, [100]方向の幅を変化させたときの Г谷 と off- Г谷のエネルギー差.



図 6: Si[001]ナノワイヤについて, [010]方向の幅を 2.0 nm と 4.2 nm に固定して, [100]方向の幅を変化させたときの Г谷 の電子伝導有効質量.

量は、断面が正方形となるときに最大となる.また [010]方向の幅を 4.2 nm とした場合には、[100]方向の 幅が 4 nm 以上で、BD は TB と非常にいい一致を見せ ている.一方で[100]方向の幅が 4 nm より小さい領域 では異なる傾向を示すことがわかった.EMA では、有 効質量は幅の変化によらないことを考えると、図 6 の 有効質量の変化も主にバンドの非放物線性によるもの であると結論付けられる.

以上の結果から、Siの[001]ナノワイヤでは、正方形 断面において、 Γ谷と off-Γ谷のエネルギー差が最小 値をとり、同時に伝導有効質量は最大値をとるので、 MOSFET応用上不利であると考えられる.したがって、 [001]ナノワイヤは断面のアスペクト比が1から離れ た形状を用いるのが良いと結論付けることができる.

#### 5. [110]ナノワイヤの伝導帯構造の計算結果

[110] 方向のナノワイヤについて伝導帯構造を計算 した結果を図7に示す.[110] ナノワイヤでは,図2の  $V_5 \ge V_6$  に起因する  $\Gamma$ 谷, $V_1 \ge V_3$  に起因する off-  $\Gamma$ 谷 が存在し,それぞれ2重に縮退しているが,特にサイ ズの小さなナノワイヤでは,縮退している谷が分離し ているのが確認できる.これは谷分裂(Valley Splitting) と呼ばれ,電子の強い閉じ込めにより起こる現象であ る[13].図7(a)では分裂幅が56 meV と非常に大きいた



図 7: 強束縛近似法を用いて計算した Si[110]ナノワイヤの伝 導帯構造. ナノワイヤの断面サイズは, (a) 1.9 nm×2.0 nm, (b) 1.9 nm×6.0 nm, (c) 6.0 nm×2.0 nm, (d) 6.0 nm×6.0 nm である.

め、MOSFETの影響に大きく関わってくると考えられ る. 伝導帯構造の断面サイズ依存性を考えると、[001] 方向の幅を大きくした図 7(b)では、off- Γ谷が大きく下 がり、この谷でエネルギー最小値をとることがわかる. off- Γ谷は有効質量が大きいため、このような状態は 好ましくない. 一方で[110]方向の幅を大きくすると図 7(c)のように、 Γ谷と off- Γ谷のエネルギー差はあまり 変わらない. このことから、[110]ナノワイヤの幅に対 する異方性が確認できる.

次に、 Γ谷を基準にした時の、 Γ谷と off- Γ谷のエ ネルギー差の幅依存性を検討する. 図8に、[110]方向 の幅を固定して[001]方向の幅を変化させたときのエ ネルギー差を示す. [110]方向の幅を 1.9 nm と4.2 nm とした場合のどちらも、[001]方向の幅を大きくすると Γ谷と off- Γ谷が入れかわかることがわかる.また、 [001]方向の幅を固定して[110]方向の幅を変化させた ときのエネルギー差を図9に示す.TB の結果から、 [001]方向の幅がどちらの場合でも、極小値をとってい ることがわかるが、これは EMA では見られず、BD で はこの傾向が読み取れることから、バンドの非放物線 性の影響を受けた現象であるといえる.

[110]ナノワイヤのΓ谷における有効質量を計算すると、図 10 と図 11 のようになる.図 10 は、[110]方

向の幅を固定して[001]方向の幅を変化させたときの 結果であり、図 11 は[001]方向の幅を固定して[110]方 向の幅を変化させたときの結果である. EMA では,有 効質量は幅に依存性せず、[001]ナノワイヤと同じく 0.20m<sub>0</sub>で一定である.また,有効質量の変化は, [110] 方向の幅の変化に対してはあまり敏感でないのに対し, [001] 方向の幅の変化に対しては比較的敏感であるこ とが読み取れる.このことから、有効質量に対しても [110]ナノワイヤの幅に対する異方性が確認できた.図 10 に着目すると、TB では[001]方向の幅の減少に従っ て有効質量が下がっているのに対し, BD では逆に有 効質量が大きくなることが確認できる.これは、BD と EMA では縮退していると考えた谷のエネルギー準 位が、谷分裂によって分離したことが原因である. Γ 点での谷分裂は、両辺が3 nm 以下の断面となるナノ ワイヤで顕著であることが確認できた.特に 1.9 nm× 2.0 nmの断面を有する[110]ナノワイヤでは、有効質量 が 0.14mo と小さな値をとることがわかった. 一方, 図 11 では、TB・BD 共に幅の減少に従って有効質量が減 少することがわかった.

以上の結果から、[110]ナノワイヤでは、バルク Si のバンドの非放物線性および谷分裂の影響によって、 幅が小さくなるにつれて、有効質量が減少することが わかった.これは[001]ナノワイヤとは全く逆の現象で あり、[110]ナノワイヤが[001]ナノワイヤよりも n-MOSFETとして優れていることを示唆している.し かしながら、[110]方向の幅よりも[001]方向の幅が大き い場合には、有効質量の重い off- Г谷が最下谷となる ため、輸送特性が低下すると考えられる.また、両辺 が 3 nm 以下の断面を有する[110]ナノワイヤでは、Г 谷で大きな谷分裂が起こり、非放物線性から考えられ る以上に有効質量が減少するため、特性の向上が期待 できる.

#### 6. 結論

[001]および[110]方向の長方形断面を有する Si ナノ ワイヤについて,強束縛近似法を用いて伝導帯構造を 計算し,解析を行った.特に幅が4 nm 程度以上のナ ノワイヤのサブバンド構造は,[001]・[110]ナノワイヤ 共に,バルク Si のバンドの非放物線性を考慮すること で精度よく表すことができた.幅が4 nm より小さい 場合には,エネルギー差と有効質量の値は強束縛近似 で得られた値からずれるが,幅依存性の傾向は再現さ れることがわかった.また,[110]方向のナノワイヤで は,幅が3 nm より小さくなると大きな谷分裂が現れ, 分離された谷は有効質量が小さくなるため,移動度(注 入速度)の向上が示唆された.



図 8: Si[110]ナノワイヤについて, [110]方向の幅を 1.9 nm と 4.2 nm に固定して, [001]方向の幅を変化させたときのΓ谷 と off-Γ谷のエネルギー差.



図 9: Si[110]ナノワイヤについて, [001]方向の幅を 2.0 nm と 4.2 nm に固定して, [110]方向の幅を変化させたときの Г谷 と off- Г谷のエネルギー差.



図 10: Si[110]ナノワイヤについて, [110]方向の幅を 1.9 nm と 4.2 nm に固定して, [001]方向の幅を変化させたときのΓ 谷の電子伝導有効質量.





- [1] N. Singh, A. Agarwal, L. K. Bera, T. Y. Liow, R. Yang, S. C. Rustagi, C. H. Tung, R. Kumar, G. Q. Lo, N. Balasubramanian, and D.-L. Kwong, High-performance fully depleted silicon-nanowire (diameter ≤ 5 nm) gate-all-around CMOS devices, IEEE Electron Device Lett., vol. 27, no. 5, pp. 383-386, May 2006.
- [2] H. Majima, H. Ishikuro, and T. Hiramoto, Experimental evidence for quantum mechanical narrow channel effect in ultra-narrow MOSFET's, IEEE Electron Device Lett., vol. 21, no. 8, pp. 396-398, August 2000.
- [3] Y. M. Niquet, A. Lherbiner, N. H. Quang, M. V. Fernandex-Serra, X. Blase, and C. Delerue, Electronic structure of semiconductor nanowires, Phys. Rev. B, vol. 73, no. 16, 165319, April 2006.
- [4] E. Gnani, S. Reggiani, A. Gnudi, P. Parruccini, R. Colle, M. Rudan, and G. Baccarani, Band-Structure Effects in Ultrascaled Silicon Nanowires, IEEE Trans. Electron Devices, col. 54, no. 9, pp. 2243-2254, September 2007.
- [5] N. Neophytou, S. G. Kim, G. Klimeck, and H. Kosina, On the bandstructure velocity and ballistic current of ultra-narrow silicon nanowire transistors as a function of cross section size, orientation, and bias, J. Appl. Phys., vol. 107, no.11, 113701, June 2010.
- [6] N. Neophytou, A. Paul, M. S. Lundstrom, and G. Klimeck, Bandstructure Effects in Silicon Nanowire Electron Transport, IEEE Trans. Electron Devices, vol. 55 no. 6, pp. 1286-1297, June 2008.
- [7] J.-M. Jancu, R. Scholz, F. Beltram, and F. Bassani, Empirical spds\* tight-binding calculation for cubic semiconductors: General method and material parameters, Phys. Rev. B, vol. 57, no. 11, pp. 6493-6507, March 1998.
- [8] N. Morioka, H. Yoshioka, J. Suda, and T. Kimoto, Quantum-confinement effect on holes in silicon nanowires: Relationship between wave function and band structure, J. Appl. Phys., vol. 109, no. 6, 064318, March 2011.
- [9] T. B. Boykin, G. Klimeck, and F. Oyafuso, Valence band effective-mass expressions in the  $sp^3d^5s$ empirical tight-binding model applied to a Si and Ge parametrization, Phys. Rev. B, vol. 69, no. 11, 115201, March 2004.
- [10] O. Madelung, Semiconductors: Group IV Elements and III-V Compounds, Splinger-Verlag, 1991.
- [11] S. Lee, F. Oyafuso, P. von Allmen, and G. Klimeck, Boundary conditions for the electronic structure of finite-extent embedded semiconductor nanostructures, Phys. Rev. B, vol. 69, no. 4, pp. 045316, January 2004.
- [12] M. Bescond, N. Cavassilas and M. Lannoo, Effective-mass approach for n-type semiconductor nanowire MOSFETs arbitrarily oriented, Nanotechnol., vol. 18, no. 25, 255201, May 2007.
- [13] T. B. Boykin, G. Klimeck, and F. Oyafuso, Valley splitting in low-density quantum-confined heterostructures studied using tight-binding models, Phys. Rev. B, vol. 70, no. 16, October 2004.