

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

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 $sp^3d^5s^*$ 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^* 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 $a_0 = 0.5431 \text{ nm}$ 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 $m_l = 0.916m_0$ 、横有効質量 $m_t = 0.191m_0$ であるが [10]、TB 法で計算すると、 $m_l = 0.891m_0$ 、 $m_t = 0.201m_0$ 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)、(1 $\bar{1}$ 0)/(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)

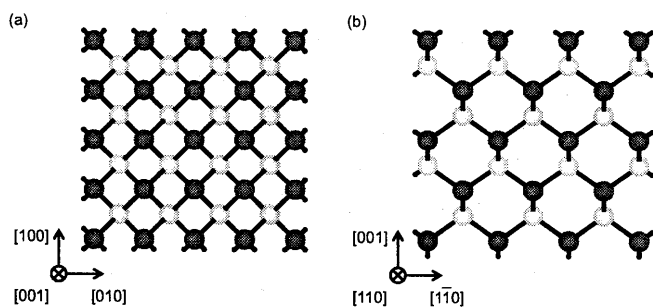


図 1: ナノワイヤの断面における結晶構造。(a) [001] ナノワイヤ。(b) [110] ナノワイヤ。

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_1 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になる。

$$E = \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(k_{[100]} - k_\Delta)^2}{m_l} + \frac{k_{[010]}^2}{m_t} + \frac{k_{[001]}^2}{m_t} \right] \quad (1)$$

ここで $\hbar$ はプランク定数/ 2π 、 k_Δ 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、 $k_{[100]} - k_\Delta = n_{[100]}\pi/w_{[100]}$ 、 $k_{[010]} = n_{[010]}\pi/w_{[010]}$ ($n_{[100]}$ 、 $n_{[010]} = 1, 2, \dots$) 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。

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

これを V_1 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

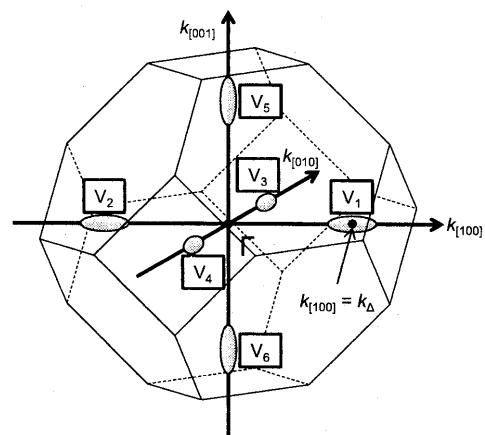


図 2: バルク Si の第 1 ブリュアンゾーンにおける伝導帯底付近の等エネルギー面。

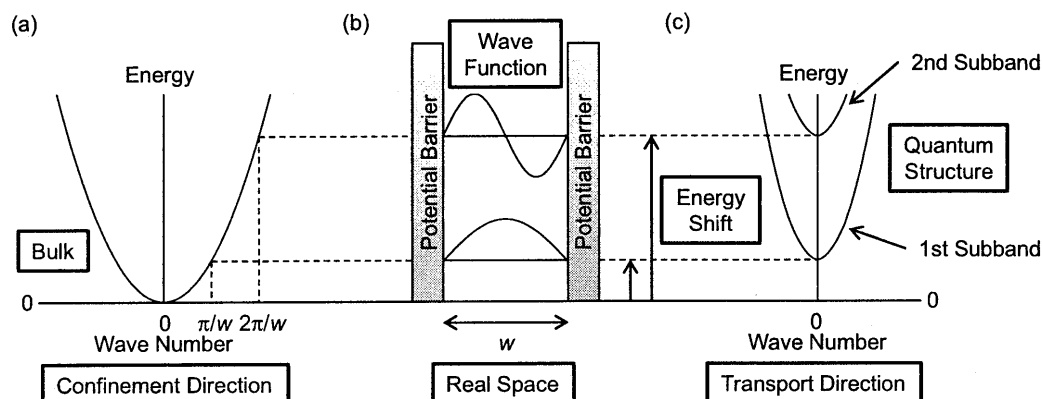


図 3: 電子の量子閉じ込めによってサブバンドができる様子. (a) 閉じ込め方向の波数に着目したときのバルクの E - k 分散. (b) 幅 w の量子井戸に閉じ込められた電子の波動関数. (c) 量子閉じ込めによって得られるサブバンド構造. (b) から得られた定在波の波数によって (a) の波数を離散化する. それぞれの波数におけるエネルギーが (c) のサブバンドのエネルギーシフトに対応し, このとき, 輸送方向の波数に注目したバルクの E - k 分散がそのまま量子構造の E - k 分散になる.

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 Γ 点で最低エネルギーをとる. この Γ 点の谷 (Γ 谷) は図 2 の V_1 , V_2 , V_3 , V_4 が投影されてできたものであり, もう一方の谷 (off- Γ 谷) は, V_5 によって構成される (V_6 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 Γ 谷は V_1 と V_2 , V_3 と V_4 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- Γ 谷は縮退していない. Γ 谷と off- Γ 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- Γ 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 $0.20m_0$ で一定である. [010] 方向の幅を 2.0 nm としたときの有効質

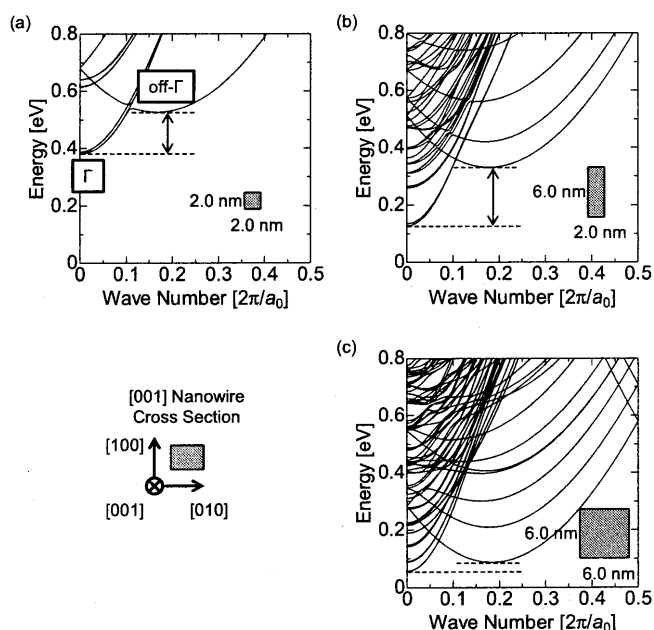


図 4: 強束縛近似法を用いて計算した Si [001] ナノワイヤの伝導帯構造. ナノワイヤの断面サイズは, (a) 2.0 nm $\times$ 2.0 nm, (b) 2.0 nm $\times$ 6.0 nm, (c) 6.0 nm $\times$ 6.0 nm である.

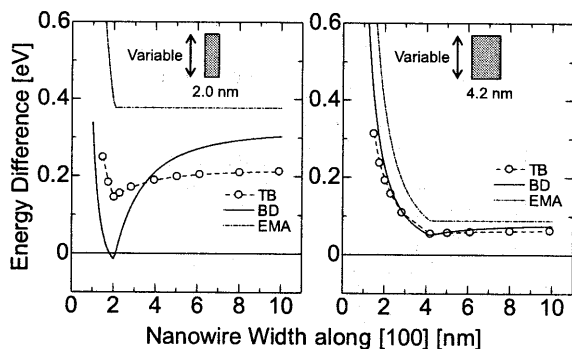


図 5: Si[001]ナノワイヤについて、[010]方向の幅を 2.0 nm と 4.2 nm に固定して、[100]方向の幅を変化させたときの Γ 谷と off- Γ 谷のエネルギー差。

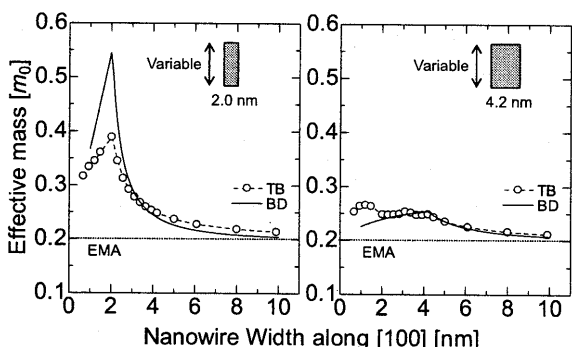


図 6: Si[001]ナノワイヤについて、[010]方向の幅を 2.0 nm と 4.2 nm に固定して、[100]方向の幅を変化させたときの Γ 谷の電子伝導有効質量。

量は、断面が正方形となるとときに最大となる。また [010]方向の幅を 4.2 nm とした場合、[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 と V_6 に起因する Γ 谷、 V_1 と V_3 に起因する off- Γ 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

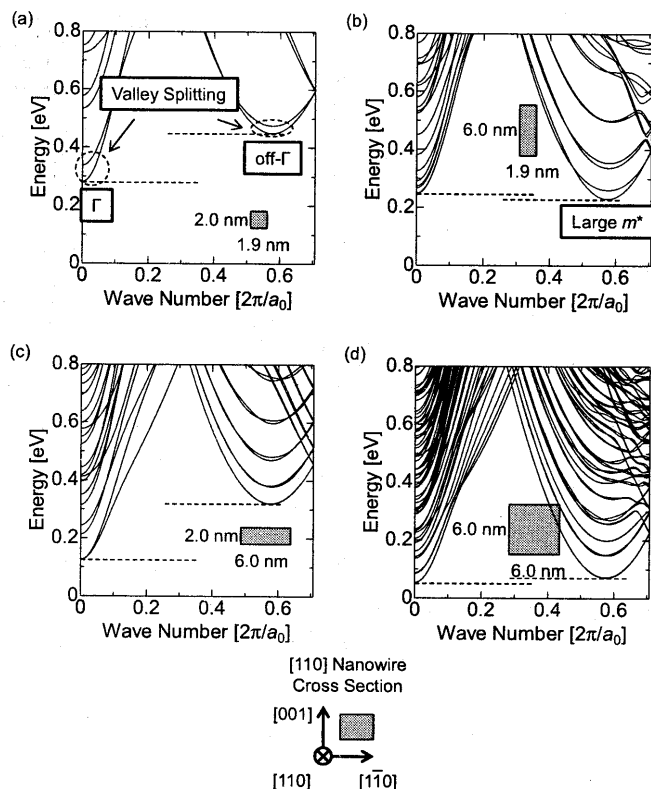


図 7: 強束縛近似法を用いて計算した Si[110]ナノワイヤの伝導帯構造。ナノワイヤの断面サイズは、(a) 1.9 nm×2.0 nm, (b) 1.9 nm×6.0 nm, (c) 6.0 nm×2.0 nm, (d) 6.0 nm×6.0 nm である。

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ので、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 $0.20m_0$ 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、有効質量に対しては[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 $1.9\text{ nm} \times 2.0\text{ nm}$ の断面を有する[110]ナノワイヤでは、有効質量が $0.14m_0$ 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- Γ 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、 Γ 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。

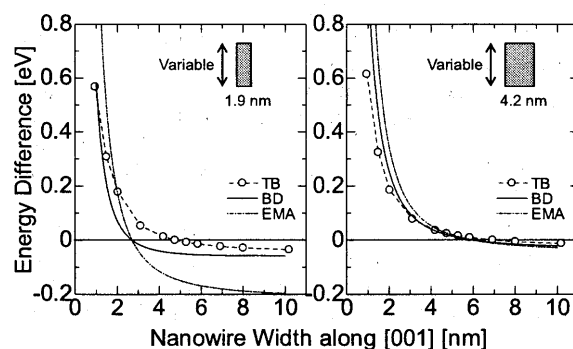


図 8: Si[110]ナノワイヤについて、[110]方向の幅を 1.9 nm と 4.2 nm に固定して、[001]方向の幅を変化させたときの Γ 谷と off- Γ 谷のエネルギー差。

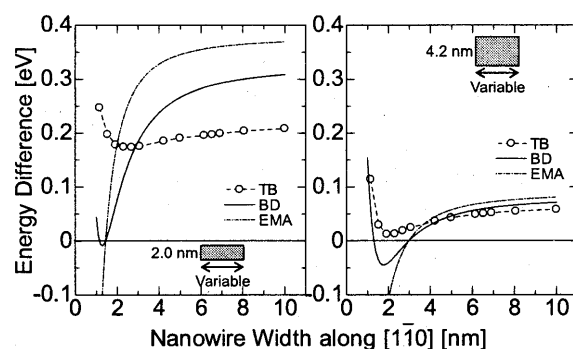


図 9: Si[110]ナノワイヤについて、[001]方向の幅を 2.0 nm と 4.2 nm に固定して、[110]方向の幅を変化させたときの Γ 谷と off- Γ 谷のエネルギー差。

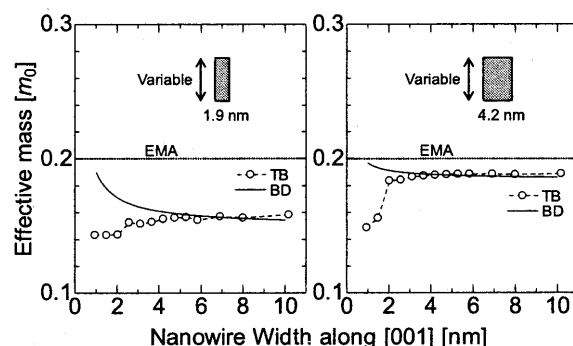


図 10: Si[110]ナノワイヤについて、[110]方向の幅を 1.9 nm と 4.2 nm に固定して、[001]方向の幅を変化させたときの Γ 谷の電子伝導有効質量。

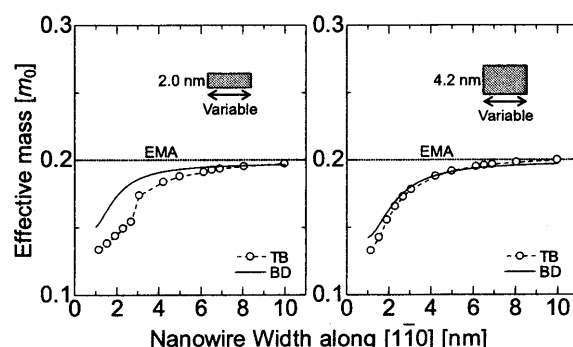


図 11: Si[110]ナノワイヤについて、[001]方向の幅を 2.0 nm と 4.2 nm に固定して、[110]方向の幅を変化させたときの Γ 谷の電子伝導有効質量。

文 献

- [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. Lherbier, N. H. Quang, M. V. Fernandez-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, vol. 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 $sp^3d^5s^*$ 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, Springer-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.