

計算材料科学による高密度双晶 GaAs ナノピラー中の電子易動度の定量的解析

Development of Multiscale Computational Model for Carrier Mobility in GaAs Nanopillars with Twin Boundaries

川 合 光 幹*

Mitsumoto KAWAI

要 旨

ABSTRACT

Selective Area Metal Organic Vapor Phase Epitaxy 法により合成された GaAs ナノピラーを対象として、双晶構造が電子の易動度に及ぼす影響を定量的に予測する手法を構築した。まず、双晶構造が電子の移動に及ぼす影響をあらわに考慮するため、第一原理計算の一手法である非平衡グリーン関数法を適用して量子化コンダクタンスを求めた。次に、古典的描像である易動度評価式をナノピラーの双晶構造を評価できる形式に変換した。最後に、第一原理計算結果を古典的描像へマルチスケール化するため、量子化コンダクタンスを散乱因子に変換して、この易動度評価式に取り入れた。その結果、実験では測定が困難な様々な双晶構造を含むナノピラーの易動度を、双晶の平均密度と易動度の関係として定量的に予測することができた。具体的には、標準的条件で合成されたサンプル (平均双晶間隔 2.48 nm 程度) において、易動度は $1000 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ 程度になると計算された。また、双晶構造が易動度に及ぼす影響は散乱因子全体の 60% 程度であると予測された。

A multiscale computational model for the calculation of the effect of (111) twin boundaries on electron mobility in GaAs nanopillars synthesized using the Selective Area Metal Organic Vapor Phase Epitaxy (SA-MOVPE) method has been developed. The Non-equilibrium Green's function method is applied in the calculation of quantum conductance in order to explicitly incorporate the effect of twin defect morphology. Quantum conductance is converted to a thermally-averaged scattering factor to connect quantum conductance to mobility. With this newly introduced factor, electron mobility can be corrected for a twin boundary scattering model. The calculated electron mobility for GaAs nanopillars synthesized under standard SA-MOVPE conditions with a mean twin spacing of 2.48 nm was $1000 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$. In addition, the contribution of twin boundary scattering to the reduction of electron mobility was estimated to be 60% of the effect of the scattering factors overall.

1. まえがき

直径が数十 nm から数百 nm 程度のナノピラー形状の半導体素子が太陽光発電デバイス、センサ、熱電変換デバイスなどの用途のために造られている⁽¹⁾。半導体素子がヘテロ接合界面を有する場合には格子不整合によるミスフィット転位が発生することがある⁽²⁾。転位は格子空孔であるため、デバイス性能にとって重要な電子の移動に対して大きな抵抗となり、これを避けるため、転位間隔より狭い直

径を持つナノピラーが合成されている。合成方法は大きく分けて二つある。一つは Vapor Liquid Solid (VLS) 法、もう一つは Selective Area Metal Organic Vapor Phase Epitaxy (SA-MOVPE) 法⁽¹⁾である。VLS 法は Au などの触媒を使用する方法である。一方、SA-MOVPE 法は触媒を使用せず基板の一部を非晶質膜で覆うことにより供給ガスの基板への到達エリアを制限してボトムアップで成長させる方法である。いずれの方法を用いてもナノピラーには電子の移動方向 (成長方向に同じ) に対して垂直に高密度な双晶構

* 基礎技術研究センター

造が観察されている⁽³⁾。双晶構造は積層欠陥であるため、電子の移動障壁となることが、積層欠陥の影響による熱伝導率の低下から類推される⁽⁴⁾。ナノピラー形状の化合物半導体を用いたデバイスでは、高易動度を見込んで設計が行われているため、双晶構造の影響による易動度の低下量によってはデバイスの性能に大きな影響が現れることが危惧される。また、ナノピラーを対象とした易動度の実験的測定は、その小ささのため困難であり、かつ、定量的解析は調査した範囲では行われていない。

そこで、本研究ではSA-MOVPE法の標準的条件により合成されたGaAsナノピラーを対象として、高密度に入った双晶構造が易動度に及ぼす影響をあらわに考慮することが可能な電子易動度の定量化手法を構築した。また、同手法を用いて、双晶構造を含むナノピラーの易動度、および、双晶構造による影響が全体の散乱因子に占める割合を計算した。

2. GaAs 半導体ナノピラーの双晶構造

計算対象としたGaAsナノピラーは $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ を成長方向として、SA-MOVPE法により、GaAs(111)B基板上にエピタキシャルに成長させた。成長条件は、基板温度 $T=750^{\circ}\text{C}$ 、キャリアガスに水素を用いて、Ga供給源としてTrimethylgallium、分圧 $P_{\text{Ga}} = 1 \times 10^{-6}$ atm、As供給源としてArsine、分圧 $P_{\text{As}} = 1 \times 10^{-4}$ atmを用いた(以後標準条件と表記する)^{(1), (3)}。

Fig. 1にナノピラーのScanning Electron Microscope (SEM)による観察結果を示す。GaAs(111)B基板上に六角柱のナノピラーが成長している様子が分かる(left)。また、成長方向 $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ および六角柱の側面方位 $\{110\}$ も示す(right)。

このナノピラーの双晶構造形態を把握するため、Transmission Electron Microscope(TEM)による観察を行い、その結果を解析した。Fig. 2に $[01\bar{1}]$ 入射のTEM観察結果を示す。成長方向 $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ に垂直に高密度に双晶面が

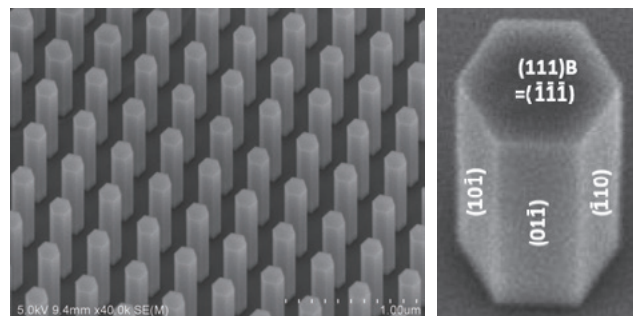


Fig. 1 Macroscopic SEM image (incidence of 30°) of synthesized GaAs nanopyllars grown on (111) B GaAs substrate (left) and magnified SEM image of one nanopyllar with plane directions (right)

入っている状態が観察された(upper)。また、50万倍で撮影されたTEM写真を画像処理により100万倍程度に拡大した写真から3C構造と呼ばれる回転双晶(middle)と2H構造(AB構造)と呼ばれる双晶形態(lower)が観察された。しかしWurtzite構造と呼ばれるABAB...の繰り返し連続構造を持った双晶構造は観察されなかった。ここで、A, B, Cは成長方向である $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 方向に対するGa-As原子対の位置関係を表す。

双晶面間隔の傾向を把握するためにTEM観察結果を用いて面間隔測定を行い、その結果に統計処理を施した。Fig. 3に双晶面間隔の測定に使用したTEM写真の一部と

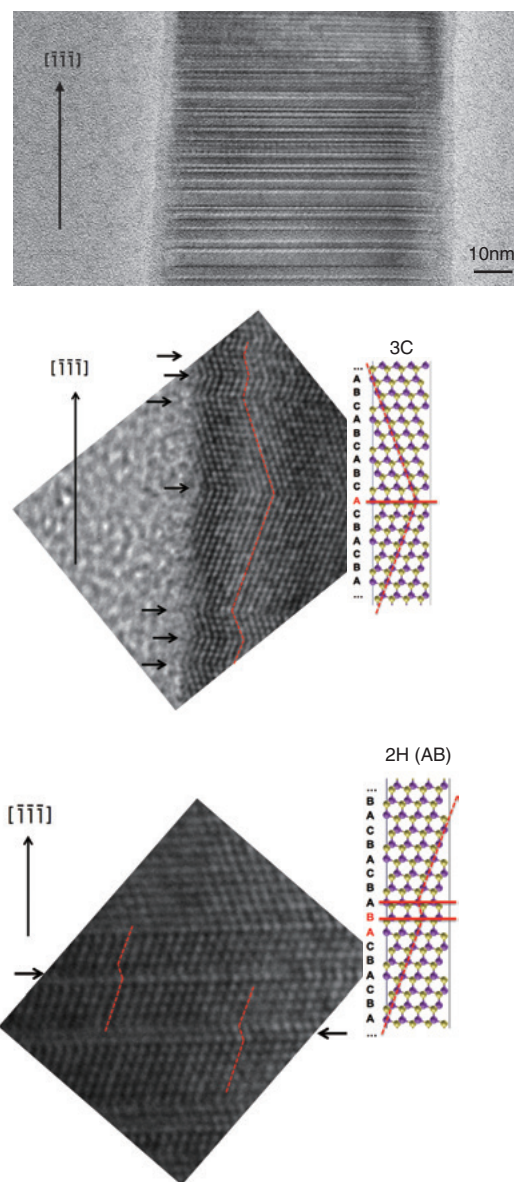


Fig. 2 Cross-sectional TEM image of multi-twinned GaAs nanopyllar (upper) 3C-type twin boundaries which have so-called ABCBA stacking sequences from bottom to top (z-direction) (middle), and 2H-type (AB-stacking) twin boundaries which have so-called ABCABABC sequences (lower). Purple and yellow spheres represent Ga and As atoms, respectively.

測定された値の統計解析結果をヒストグラムで示す (横軸: 双晶面間隔). 平均双晶面間隔は 2.48 nm, 標準偏差は 1.64 nm (総測定数 248) であった. また, 80% 以上が 3C 構造, 20% 以下が 2H 構造であった.

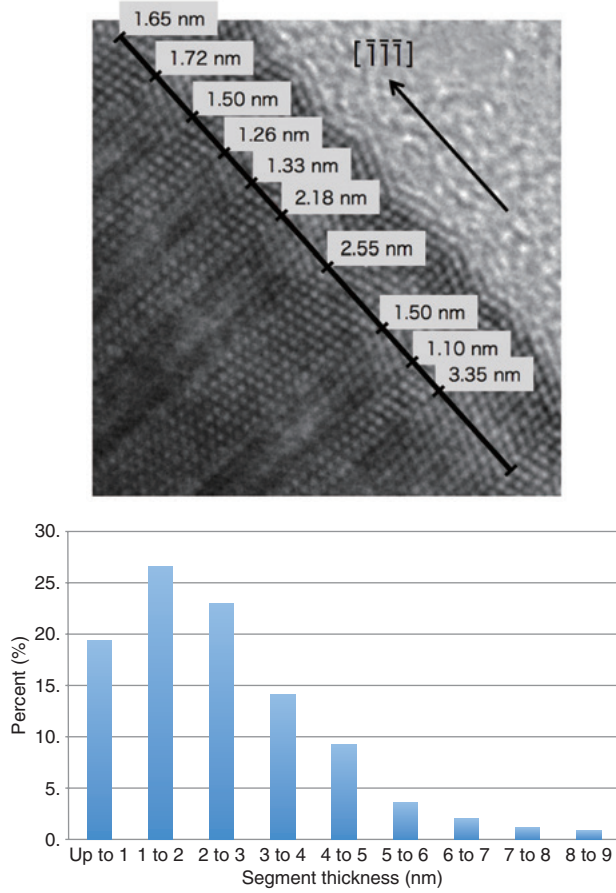


Fig. 3 TEM image of measured twin spacing along $[111]$ direction (upper), and histogram of twin spacing with 248 sampling points, average twin spacing of 2.48 nm (lower)

3. 計算方法

電子の易動度は, 古典的描像として, ドリフト速度 v_{drift} と電界 E の比として以下のように定義される.

$$M \equiv \frac{\langle v_{drift} \rangle}{-E} \quad (1)$$

この電子の動きやすさの指標に対して双晶構造が与える影響を定量化した. 理論計算式の構築にあたっては, 双晶構造が及ぼす影響をあらわに取り入れる必要がある. そのため, 最初に様々な双晶構造を有する原子モデルを用いて, 実験値を用いない第一原理計算手法を用いて量子化コンダクタンスを求めた (3.1. 節). つまり, 電子を波動として捉え電子散乱を評価した. 次に, この値を散乱因子に変換することにより古典的描像である易動度評価式へ取り込

みマルチスケール化を行った (3.2. 節).

更に 3.3. 節で易動度に影響を及ぼす他の因子と双晶構造による影響の関係を示す.

3.1. 量子化コンダクタンスの計算手法

量子化コンダクタンス計算には密度汎関数法に基づく非平衡グリーン関数法 (Non Equilibrium Green's Function 法: NEGF 法)⁽⁵⁾を用いた. 計算コードは SIESTA⁽⁶⁾⁻⁽⁸⁾を用いた. このコードでは, 内殻電子はノルム保存型擬ポテンシャルとして扱われ, 基底関数には Linear Combination of numerical Atomic Orbital 法 (LCAO method) が用いられている. 交換相関汎関数は GGA-PBE⁽⁹⁾, Energy Cutoff は 300 Rydberg, k 点 (逆格子空間上の座標) 分割は Monkhorst-Pack 法⁽¹⁰⁾に基づいて $31 \times 31 \times 1$ を用いた.

この NEGF 法により直接算出される値は, k 点およびエネルギー ϵ の関数である透過率 $T(k, \epsilon)$ となる. 透過率と量子化コンダクタンス $G(k, \epsilon)$ には以下の関係が成立する⁽¹¹⁾.

$$G(k, \epsilon) \equiv \frac{I}{V} \int_k \int_{\epsilon} T(k, \epsilon) d\epsilon dk \quad (2)$$

Fig. 4 に, 計算に用いたセットアップを積層欠陥が 1 層入ったモデル (3C 双晶構造) で例示した. NEGF 法は, 電子の流入および流出源である電極を設定して, その影響をグリーン関数における自己エネルギーという形で考慮する方法である. そのため, 計算対象の原子モデルは大別して三つの部分に分割される. 左右の電極 (とみなされる部分) と電極からの電子が送り込まれる部分 (電子が散乱する部分). これらの電極間に与えられる電位差は両電極間の化学ポテンシャルに差を与える形で考慮される. つまり, フェルミエネルギーを ϵ_f として左右電極に $\epsilon_f \pm eV/2$ の電位差が付与される.

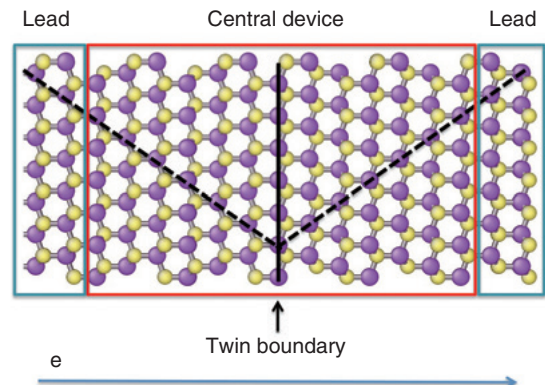


Fig. 4 Configuration of system treated by NEGF method with left and right leads along z -axis (electron transfer direction: $[111]$), under two-dimensional periodic boundary conditions on xy plane. Yellow spheres indicate arsenic, and purple spheres indicate gallium

考慮される双晶面が1層のこのモデルにおいては、電子が散乱する部分(双晶部分)にGa-Asを一つのペアとして13層、これに接する左右の電極部にGa-Asを2層ずつとした原子モデルを用いた。総原子数は136原子(2x2x(13+2+2)x2)である。

3.2. 量子化コンダクタンスの易動度への変換方法

まず古典的描像において双晶面で散乱される電子の捉え方の概要を示して、次に量子的描像である量子化コンダクタンスとの結び付け(マルチスケール化)方法を示す。

古典的描像において、双晶構造を唯一の散乱因子と考え、電子がある双晶面から次の双晶面に向かって、電界 E によって τ 時間加速されるとする。ここで電界が小さいと仮定すると、電子のドリフト速度 v_{drift} は以下の式で評価される。

$$\langle v_{drift} \rangle = -\frac{1}{2} \cdot \frac{eE\tau}{m} \quad (3)$$

e : 素電荷

E : 電場

m : 電子の質量

τ : 散乱間の時間

係数の $1/2$ は平均を表す。これは、ナノピラー中を伝導するすべての電子が散乱源である双晶面に必ず到達して散乱されること、および、ドリフト速度は双晶面で散乱された直後はほぼゼロとみなすことができ、次の散乱体で散乱されるまで $v_{drift} \propto E$ により線形的に加速されるとみなすことができることによる。

次に散乱間の時間 τ をモデル化する。ドリフト速度は、熱速度と比較して非常に小さいため、散乱間の時間は電界に対して独立であり、かつ、熱速度に律速されていると仮定すると、散乱間の時間は次式で表すことができる。

$$\tau = \frac{\lambda}{\sqrt{\langle v \cdot v \rangle}} = \frac{\lambda \sqrt{m}}{\sqrt{\langle mv \cdot v \rangle}} = \frac{\lambda \sqrt{m}}{\sqrt{k_B T}} \quad (4)$$

λ : 散乱間の距離

k_B : ボルツマン定数

T : 温度

ここで、ナノピラーを一次元とみなしている。よって、易動度 M [$\text{m}^2/\text{V}/\text{s}$] は、式(1)、式(3)および式(4)から以下のように表すことができる。

$$M \equiv \frac{\langle v_{drift} \rangle}{-E} = \frac{e\lambda}{2\sqrt{mk_B T}} \quad (5)$$

また、電子密度を n とおくと、電流密度 J は以下の式で表すことができる。

$$J = -en\langle v_{drift} \rangle = \frac{e^2 n \lambda E}{2\sqrt{mk_B T}} \quad (6)$$

式(6)を用いると、古典的描像における電子の伝導率 σ [$\Omega^{-1}\text{m}^{-1}$] は式(7)の通りとなり易動度と伝導率の関係は維持されていることが分かる。

$$\sigma \equiv \frac{J}{E} = \frac{e^2 n \lambda}{2\sqrt{mk_B T}} enM \quad (7)$$

以上のようにナノピラー中の双晶構造を散乱因子として導出された易動度の式(5)は、以下に示すように実験から得られた易動度の評価式⁽¹²⁾とよい一致が見られた。参考文献(12)の式(12)によれば、 l を平均自由行程として、易動度 M_l は以下のように定式化されている(参考文献(12)では易動度は μ と記載されている)。

$$M_l = (4/3)el \frac{1}{\sqrt{2\pi mk_B T}} \quad (8)$$

この式(8)と式(5)の比を取ると以下のように1.064となる(双晶構造が唯一の散乱体であるため $\lambda = l$ とおいた)。

$$\frac{M_l}{M} = \frac{4/3\sqrt{2\pi}}{1/2} \approx 1.064$$

次に NEGF 計算から得られる量子化コンダクタンスから構成される散乱係数 $s(k_{\perp}, \epsilon)$ を以下の式(9)の通り定義する。

$$s(k_{\perp}, \epsilon) \equiv 1 - \frac{G(k_{\perp}, \epsilon)}{G_0(k_{\perp}, \epsilon)} \quad (9)$$

ここで、 G_0 , G は、それぞれ双晶構造が存在しない場合の量子化コンダクタンス、存在する場合のそれを表す。

それぞれの量子化コンダクタンスは NEGF 法により、 k 点とエネルギーの関数として求められる(3.1. 節)。また、 $k_{\perp} \equiv (k_x, k_y)$ は電子の移動方向である z 軸に対して垂直に双晶面が存在するため、散乱前後において逆格子空間上の $k_x - k_y$ 平面で周期境界条件が維持されることを意味する。したがって、散乱前もしくは後の状態を (k_x, k_y) により指定することができる。

式(9)により定義された散乱係数は、その極限において、 $s(k_{\perp}, \epsilon) = 0$ の時は双晶構造による散乱はなく、 $s(k_{\perp}, \epsilon) = 1$ の時は双晶構造が非常に強い散乱因子となることを表している。

実際の計算においては、以下の式(10)に示すように各 k 点と各エネルギー準位における量子化コンダクタンスの熱平衡平均を、電子が存在する範囲において、計算した。そのため、熱平衡状態においてエネルギー ϵ の状態を占める電子の存在確率を表すフェルミ分布関数を用いた。温度 T

は 300K とした。

$$\langle s \rangle = \frac{\sum_{k_{\perp}} \int_{\mu}^{+\infty} f(\epsilon) G_0(k_{\perp}, \epsilon) s(k_{\perp}, \epsilon) d\epsilon}{\sum_{k_{\perp}} \int_{\mu}^{+\infty} f(\epsilon) G_0(k_{\perp}, \epsilon) d\epsilon} \quad (10)$$

$f(\epsilon)$: フェルミ分布関数

$$f(\epsilon) = \left(1 + e^{\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}} \right)^{-1} \quad (11)$$

μ : 化学ポテンシャル

式 (10) に従って計算された散乱係数の易動度および伝導率への導入方法を以下に示す。双晶構造により及ぼす影響が異なるため、それぞれの構造による影響が取り入れられた散乱係数を用いて補正する。具体的には、双晶間隔 λ_{TB} に対して量子散乱を考慮した散乱因子 $\langle s \rangle$ により補正を行い平均自由行程とした。易動度および伝導率に対して補正を行った式を以下の式 (12), (13) に示す。

$$M = \frac{e}{2\sqrt{mk_B T}} \cdot \frac{\lambda_{TB}}{\langle s \rangle} \quad (12)$$

$$\sigma = \frac{e^2 n}{2\sqrt{mk_B T}} \cdot \frac{\lambda_{TB}}{\langle s \rangle} \quad (13)$$

以上のように双晶構造における量子化コンダクタンスの影響を古典的描像である評価式に取り込みマルチスケール化を行った。

3.3. 易動度へ影響を及ぼす他の因子との関係

3.2. 節では、双晶構造を唯一の散乱因子として易動度を計算する手法を示した。しかし、実際の電子散乱には他に多くの因子が関わっている。それらを含めた易動度の総和 M_{total} は以下の式 (14) によって計算される⁽¹³⁾。右辺はそれぞれの散乱因子から影響を受けた場合の個々の易動度を示している。

$$M_{total}^{-1} = M_{e-TB}^{-1} + M_{e-e}^{-1} + M_{e-phonon}^{-1} + M_{e-dopant}^{-1} + M_{e-surface}^{-1} + \dots \quad (14)$$

M_{e-TB}^{-1} : 双晶構造

M_{e-e}^{-1} : 電子間散乱

$M_{e-phonon}^{-1}$: フォノン散乱

$M_{e-dopant}^{-1}$: ドーパントでの散乱

$M_{e-surface}^{-1}$: 表面散乱

右辺の初項を除く項の和は、双晶構造以外の因子による影響として、双晶構造が観察されていない薄膜 GaAs での

測定結果⁽¹⁴⁾を用いることが可能である。そこで、 M_{total}^{-1} を求めるには、まず式 (12) を用いて $M = M_{e-TB}$ を求め、次に、上記の易動度測定結果を用いて、式 (14) に従って計算を行った。また、双晶構造による影響が全体の散乱因子に占める割合は、 M_{e-TB} と M_{total} の比として求めた。

4. 結果と考察

NEGF 計算により得られた量子化コンダクタンスを構築した易動度の定量的解析手法〔式 (12)〕に取り込んで計算した結果を示す。4.1. 節で量子化コンダクタンス計算結果、4.2. 節で量子化コンダクタンス計算結果を易動度へ変換した結果を示す。

4.1. 量子化コンダクタンス計算結果

Fig. 5 と Fig. 6 に基本的な双晶構造として 3C 構造と 2H 構造を対象とした計算結果を示す。原子モデルは電子の移動方向を z 軸 ($=[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$) にとっている。計算結果の縦軸は双晶構造を有しない場合の量子化コンダクタンスに対する比、横軸はエネルギーとして図示している。いずれの双晶構造においても量子化コンダクタンスが低下しており、散乱源としての影響が現れている。ただ、各双晶構造ごとの

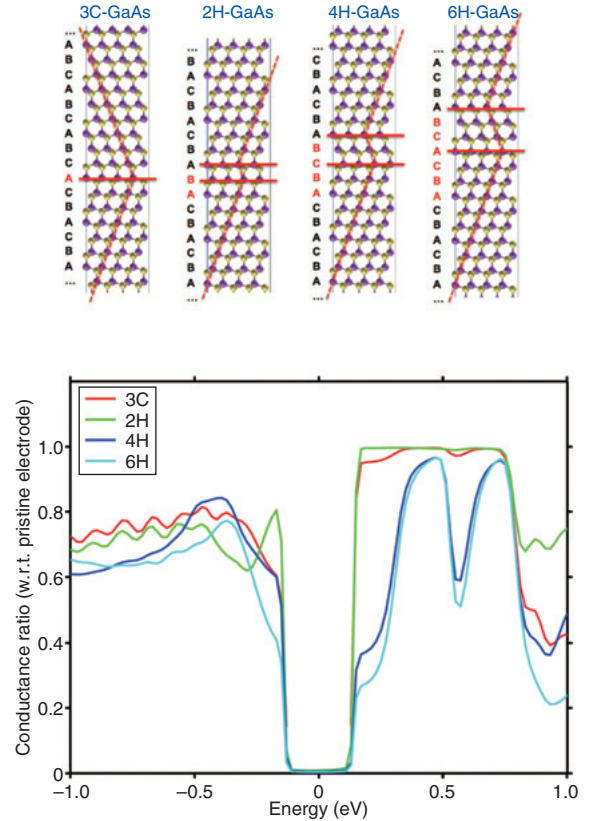


Fig. 5 Quantum conductance calculated using NEGF in different 3C-type structures. Schematic showing GaAs crystals with different types of 3C twin boundaries (upper). Calculated quantum conductance with respect to energy (lower).

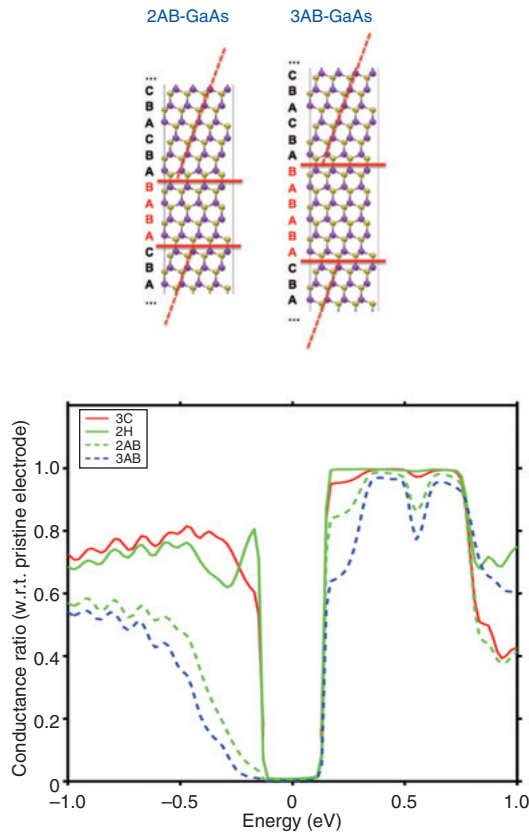


Fig. 6 Quantum conductance calculated by NEGF in different AB-type structures. Schematic showing GaAs crystals with different types of AB twin boundaries (upper). Calculated quantum conductance with respect to energy (lower).

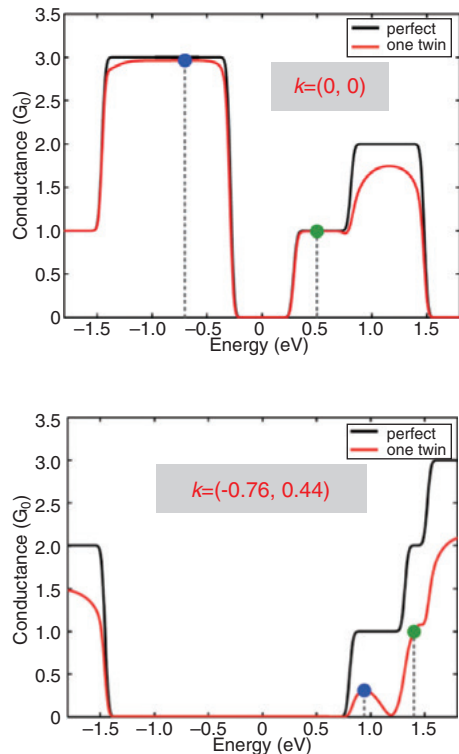


Fig. 7 Quantum conductance with respect to k-points in 3C twin morphology

系統的な影響は観察されなかった。

Fig. 7 に 3C 双晶面を一枚有する構造 (Fig. 5 上図の左の構造) において、 k 点別に量子化コンダクタンスを解析した結果を示す。同じ双晶面における散乱でも k 点により挙動が異なることが分かる。このことから、双晶面が量子化コンダクタンスに及ぼす影響は k 点およびエネルギー依存性があることが分かる。つまり、双晶面間隔が同じであったとしても、双晶構造が異なれば量子化コンダクタンスが異なると言える。

Fig. 8 と Fig. 9 に Fig. 5 と Fig. 6 に示された結果を式 (2) に従って電流電圧特性 (I-V 特性) に変換した結果を示す。ここで計算された双晶面間隔の範囲において、3C 型の場合 (Fig. 8)、双晶面間隔による系統的な差異は現れなかった。ただ、2H 型の場合 (Fig. 9)、双晶面の数が増えると電流が流れにくくなる傾向がこの双晶面の数でも認められた [elec (双晶無) $\rightarrow$ 3C $\rightarrow$ 2H $\rightarrow$ 2AB $\rightarrow$ 3AB]。

次に 2 章のナノピラー解析結果から抽出された特徴から、特に双晶面間隔に着目して、代表的ナノピラー双晶構造モデルを 2 構成 14 種類作成した。Fig. 3 のヒストグラムから双晶面間隔の比率は、40% が 2 nm 以下 (ABC 積層および AB 積層)、20% が 2 から 3 nm (ABCx2)、20% が 3 から 5 nm (ABCx3)、20% が 5 nm 以上 (ABCx5) と分類した。一部に AB 積層 (2H) も観察されたことから、上記の比

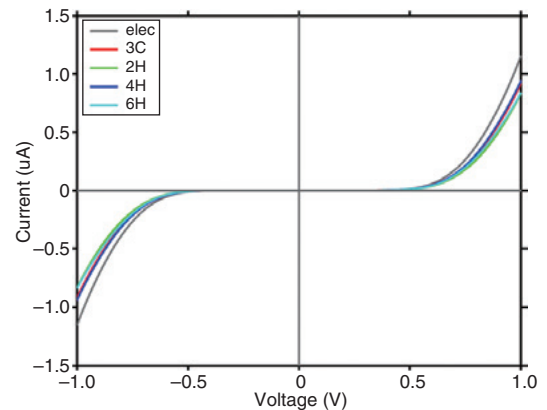


Fig. 8 I-V curve for 3C-type twin boundaries

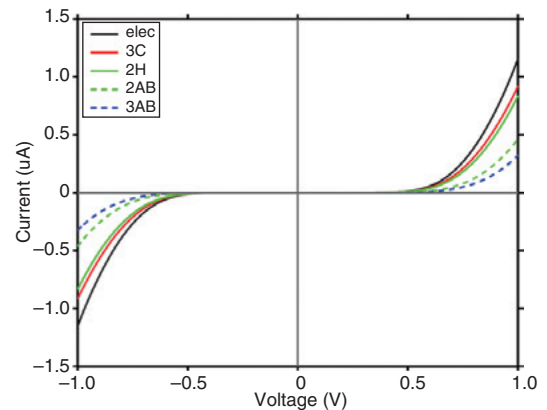


Fig. 9 I-V curve for AB-type twin boundaries

率の双晶間隔のモデルに AB 積層を取り入れた構造も含めて代表的モデルとした。AB 積層を挿入する場合には、各モデルのそれぞれの双晶界面に挿入した。Fig. 10 にその代表的双晶構造モデルの一例を示す。左は双晶間隔が規則的に配列された場合、右は不規則に配列された場合を代表している。

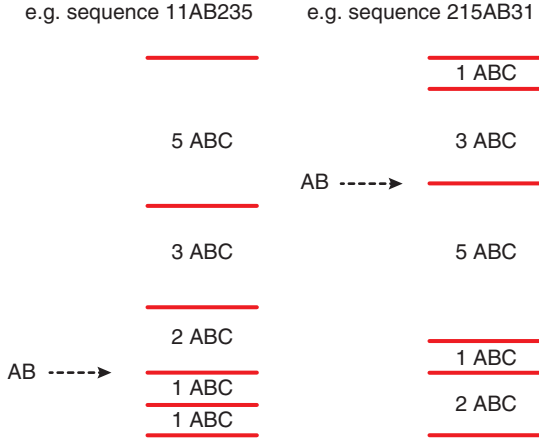


Fig. 10 Examples of representative twin sequence models AB stacks are inserted in 3C boundaries (red line) Ordered twin sequence from bottom to top with AB-stacking between “1ABC” and “2ABC” (left); Random twin sequence with AB-stacking between “5ABC” and “3ABC” (right)

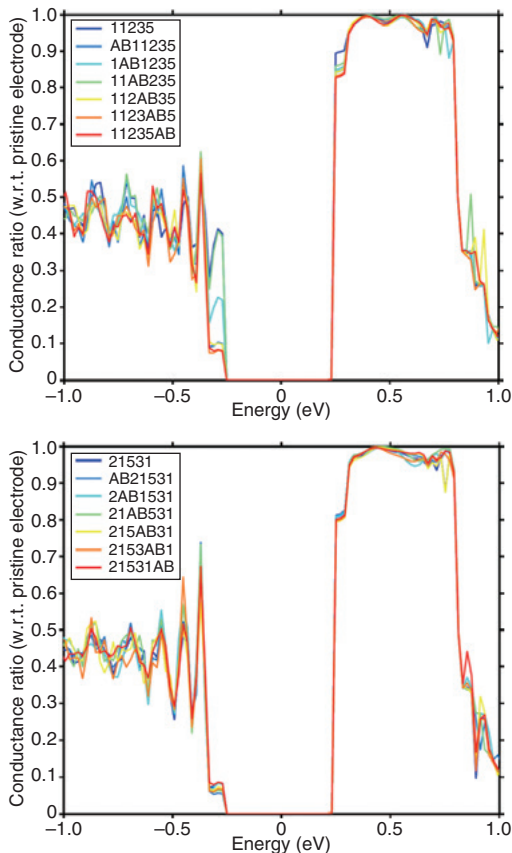


Fig. 11 Quantum conductance with respect to energy in representative models: Ordered twin sequences (upper); Random twin sequences (lower)

この構成での量子化コンダクタンス計算結果を Fig. 11 に示す。双晶面間隔の配列による影響が価電子帯に見られた (図中の矢印) が、全体的な傾向はほぼ同じであった。また、AB 構造の有無による顕著な差は見られなかった。

以上の結果から、双晶間隔の配列が量子化コンダクタンスに及ぼす影響は計算された範囲において大きくない。

4.2. 量子化コンダクタンスの易動度への変換結果

4.1. 節では双晶構造の影響をあらわに考慮するため、原子モデルを用いて量子化コンダクタンスを計算した。これらに、他の双晶間隔の組合せを用いて計算した量子化コンダクタンスも含めて、式 (12) を用いて易動度へ変換した結果を Fig. 12 に示す。変換された易動度は平均双晶間隔に比例しており、古典的描像の直感とも一致している。次に、式 (14) を用いて双晶構造による影響が全体の散乱因子に占める割合を算出した。右辺第一項には Fig. 12 から得られる結果を代入した。右辺のその他の項は、薄膜 GaAs (双晶構造無) を対象とした易動度測定結果⁽¹⁴⁾を用いた。標準的な条件で合成されたナノピラーの平均双晶間隔は Fig. 3 より 2.48 nm 程度である。よって Fig. 12 より $M_{e-TB} \approx 1600 \text{ cm}^2/\text{V/s}$ と見積もることができた。参考文献 (14) より薄膜 GaAs (双晶構造無) の易動度は ($n \approx 10^{18}/\text{cm}^3$, $T = 300 \text{ K}$), $M_{e-e}^{-1} + M_{e-phonon}^{-1} + M_{e-dopant}^{-1} + M_{e-surface}^{-1} + \dots \approx 2500 \text{ cm}^2/\text{V/s}$ である。従って、双晶構造が導入されることにより易動度は $M_{total} \approx 1000 \text{ cm}^2/\text{V/s}$ になると計算された。また、易動度に影響を及ぼす散乱因子全体に対して双晶構造による影響が占める割合は 60% 程度と計算された。

上記の結果は、平均双晶間隔が 2.48 nm 程度の場合、双晶構造を有しない GaAs のそれと比較して易動度の低下率が 60% であることを示唆し、高密度双晶の存在は、易動度に対して大きな影響を与える因子であることが分かった。

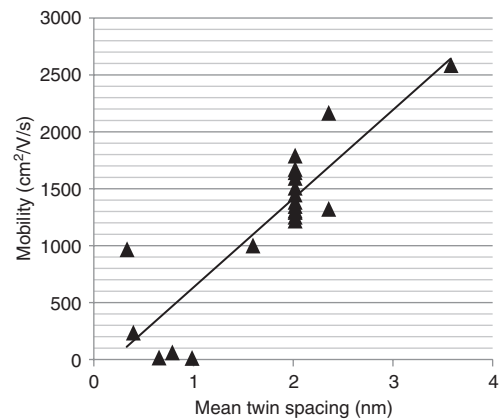


Fig. 12 Predicted mobility as a function of mean twin spacing

5. まとめ

双晶構造が電子の易動度に及ぼす影響を定量的に予測する手法を構築した。第一原理計算に立脚した NEGF 法を用いることにより、双晶構造をあらわに考慮した。その NEGF 法により計算された量子化コンダクタンスを散乱係数に変換して易動度評価式へ取り込みマルチスケール化を行った。これにより双晶構造を有するナノピラーの易動度を計算することを可能にした。

本手法を用いて計算を行った結果、SA-MOVPE 法における標準的な条件により成長させた GaAs 半導体ナノピラー (双晶間隔 2.48 nm 程度) では、電子の易動度が $1000 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ となった。双晶構造を有しない薄膜 GaAs の易動度は $2500 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ と測定されているので、双晶構造による影響が全体の散乱因子に占める割合は 60% 程度であると計算され、双晶構造による散乱の影響を独立に評価することができた。

以上の通り、計算材料科学は実験では観測が困難な事象に対してそのメカニズムを明らかにすることが可能であり、得られた結果は、材料開発、デバイス設計などに適用することができる。

参考文献

- (1) Goto, H., Nosaki, K., Tomioka, K., Hara, S., Hiruma, K., Motohisa, J., Fukui, T.: Growth of Core-Shell InP Nanowires for Photovoltaic Application by Selective-Area Metal Organic Vapor Phase Epitaxy, Appl. Phys. Express 2, 035004(2009)
- (2) Kavanagh, K. L.: Misfit dislocations in nanowire heterostructures, Semicond. Sci. Technol. 25, 024006(2010)
- (3) Ikejiri, K., Sato, T., Yoshida, H., Hiruma, K., Motohisa, J., Hara, S., Fukui, T.: Growth characteristics of GaAs nanowires obtained by selective area metal-organic vapour-phase epitaxy, Nanotechnology 19, 265604(2008)
- (4) Guthy, C., Nam, C.-Y., Fischer, J. E.: Unusually low thermal conductivity of gallium nitride nanowires, J. Appl. Phys. 103, 064319(2008)
- (5) Haug, H., Jauho, A.-P.: Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors, Springer Series in Solid-State Science, Springer(1996)
- (6) Rocha, A. R., García-Suárez, V. M., Bailey, S., Lambert, C., Ferrer, J., Sanvito, S.: Spin and molecular electronics in atomically generated orbital landscapes, Phys. Rev. B 73, 085414(2006)
- (7) Sánchez-Portal, D., Ordejón, P., Artacho, E., Soler, J. M.: Density-Functional Method for Very Large Systems with LCAO Basis Sets, Int. J. Quantum Chem., Vol. 65, Issue 5, p. 453-461(1997)
- (8) Soler, J. M., Artacho, E., Gale, J. D., García, A., Junquera, J., Ordejón, P., Sánchez-Portal, D.: The SIESTA method for *ab initio* order-*N* materials simulation, J. Phys.:Condens. Matter 14, p. 2745-2779(2002)
- (9) Perdew, J. P., Burke, K., Ernzerhof, M.: Generalized Gradient Approximation Made Simple, Phys. Rev. Lett. 77, 3865(1996)
- (10) Monkhorst, H. J., Pack, J. D.: Special points for Brillouin-zone integrations, Phys. Rev. B 13, 5188(1976)
- (11) Buttiker, M.: Symmetry of electrical conduction, IBM J. Res. Develop., 32(3), p. 317-334(1988)
- (12) Pearson, G. L., Bardeen, J.: Electrical properties of pure silicon and silicon alloys containing boron and phosphorus, Phys. Rev., 75, p. 865-883(1949)
- (13) Li, S. S.: Semiconductor Physical Electronics, Second Edition, Springer, 697 p. (2006)
- (14) Levinshtein, M., Rumyantsev, S., Shur, M. S., Handbook Series on Semiconductor Parameters, Vol. 1, p. 85, World Scientific(1996)

■ 著 者 ■



川合光幹