

バルクシリコンおよびシリコンナノワイヤーの ピエゾ抵抗物性シミュレーション

（立命大理工リサーチ、神戸大院工、立命大理工） 中村 康一、磯野 吉正、鳥山 寿之

【序】 単結晶シリコンはその安定した機械的性質から超小型メカニカルセンサ構成材料の有力な候補として挙げられているが、微細化した場合に生じるセンサ感度の著しい低下が超小型ピエゾ抵抗センサ実現への大きなネックであり、バルクシリコンに替わる新しい検出素子の開発が急務となっている。とりわけ、バルクシリコンの安定した機械的性質を維持したまま全く異なる電気的性質を示す低次元単結晶シリコンは、新規ナノスケールピエゾ抵抗センサとして実現が見込まれる非常に有力な材料候補として注目を集めており、実験・理論両面から作製プロセスや物性評価等の検証が進んでいる。本研究では n 型および p 型半導体についてピエゾ抵抗係数を求める手法を提案し^[1]、バルクシリコンおよびシリコンナノワイヤー (SiNW) に関するピエゾ抵抗物性予測シミュレーションを行って、計算手法の信頼性とナノスケールピエゾ抵抗センサ実現の可能性について検討した。

【計算手法】 一般に、比抵抗テンソル $\vec{\rho}$ はキャリア密度と有効質量テンソルを用いて表すことができる。キャリア密度と有効質量テンソルは第一原理バンド構造から導出できる物性量であり、ひずみによってバンド構造が変わるとこれらの物性量が変化して、比抵抗に影響を及ぼすことになる。具体的には、キャリアの電気伝導率テンソル \vec{G} は各バンドに対して決まるバンドキャリア密度、バンド有効質量テンソル、緩和時間テンソルを用いて

$$\vec{G} = \vec{\rho}^{-1} = e^2 \left(\sum_{j \in \text{CB}} n_j (\vec{m}_{e,j}^*)^{-1} \cdot \vec{\tau}_{e,j} + \sum_{j \in \text{VB}} p_j (\vec{m}_{h,j}^*)^{-1} \cdot \vec{\tau}_{h,j} \right) \quad (1)$$

と書け、バンドキャリア密度 n_j および p_j はフェルミエネルギー E_F と温度 T によって決定される。実際の n 型または p 型半導体では単位格子あたりのキャリア数を δ とすると $\delta \ll 1$ であり、 $\delta = 1$ の電子の過不足を考える慣習的なドープ半導体の表現手法はデバイス材料の電子物性シミュレーションを行うには適当でない。そこで、単位格子あたりのキャリア数 δ の状態 (たとえば、 $\delta = 10^{-3}$, 10^{-4} 等) を、バンドエネルギーが真性半導体と同じであるという仮定の下にフェルミエネルギーをシフトさせることによって表現した^[1]。各バンドのキャリア有効質量テンソル \vec{m}_j^* は、その逆行列要素が逆格子空間上のバンド曲線の曲率を用いて定義される。また、緩和時間については、「すべてのバンドの緩和時間が等しく、ひずみのあるなしに関わらず一定」という近似を用いた。この取り扱いは一見粗いようにも思われるが、ピエゾ抵抗係数を求める際にはキャリア伝導率の比をとるので、緩和時間が打ち消されることを考慮すると簡単で有効な取り扱いである。

【結果および考察】 n 型半導体バルクシリコンでは、キャリア電子が局在する伝導帯のエネルギー極小点 (伝導帯の谷) がブリルアンゾーン内に 6 ヶ所存在する。[001]方向や[110]方向に伸張する引っ張り応力を加えると、6 ヶ所の伝導帯の谷に等価に分布していたキャリア電子がエネルギーのより低い谷に優先して分布するようになるため、伝導性が大きく変化する。このとき伝導率テンソル \vec{G} は

$$\vec{G} = \vec{\rho}^{-1} = e^2 \sum_{j \in \text{CB}} \sum_{R_\alpha} n_{j,R_\alpha} (\vec{m}_{e,j,R_\alpha}^*)^{-1} \cdot \vec{\tau}_{e,j} \quad (2)$$

と表現できる。ここで $\{R_\alpha\}$ は各バンドにおいてエネルギーの極小点を1つ含む逆格子空間領域の組を表す。(2)式右辺の n_{j,R_α} は領域 R_α に含まれるキャリア電子に関するキャリア密度であり、設定した

δ に対してフェルミエネルギーをシフトさせた後、領域 R_α に限ってフェルミ因子を積分して計算する。応力を作用させる前後それぞれの比抵抗テンソルから、 $\delta = 10^{-3}$ (キャリア密度 $6.13 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) でのピエゾ抵抗係数の値を計算すると、表1のように得られた。[001]単軸引っ張りモデルおよび(001)面せん断モデルから得られる π_{11} 、 π_{12} 、および π_{44} はSmithによる実測値^[2]を定性的に再現し、後発の実験結果^[3]とは定量的にもほぼ一致した。

p型半導体バルクシリコンでは、価電子帯エネルギー極大点が逆格子空間の原点(Γ 点)に位置する。通常の第一原理計算によるバンド構造では、応力のない場合に価電子帯最上部にある3つのバンドが Γ 点で三重縮退するが、これはスピン-軌道相互作用の効果を全く考慮していないからであり、実際には Γ 点においてバンド分裂が生じている。スピン-軌道カップリングによるバンド分裂幅 Δ_0 はバルクシリコンにおいては0.04 eV程度と微小だが^[4]、応力印加によるバンドエネルギーシフトと同じオーダーであるためホール伝導性にきわめて大きな影響を与える。スピン-軌道カップリングを定量的にバンド構造に反映させるには、ハミルトニアン

$$\hat{H}_{SO} = (\hbar/4m^2c^2)(\nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (3)$$

を摂動ハミルトニアンとして扱い、得られた摂動エネルギーを分裂幅として考慮すればよい。

さらに、我々はさまざまな面方位のSiNWモデルを導入し、n型およびp型半導体状態でのピエゾ抵抗係数を計算した。三次元単位格子による周期境界条件を用いてもSiNW間の相互作用が無視できるモデルの場合、キャリア輸送現象はワイヤー軸と平行な方向のみ取り扱えるので、前出の計算手法はテンソル量ではなくスカラー量で議論できる。図1に示したように、断面に $\langle 001 \rangle$ 方位をもつSiNWモデルでは、応力がない場合(図1a)比較的小さなホール有効質量をもつバンド(軽いホールバンド)にホールが局在するのに対し、ワイヤー軸に平行な方向に単軸引っ張り応力を加えると(図1b)バンド順序の交換が起こって非常に大きなホール有効質量をもつバンド(重いホールバンド)にホールが移動する。ホール有効質量の大きなバンドに占有するホールの割合が突然増えるだけでなく、引っ張り応力の作用により重いホールバンドの有効質量自体がさらに大きくなる効果も加わって急激に伝導率が減少し、きわめて大きなピエゾ抵抗係数が得られた^[1]。この結果を受けて、p型 $\langle 001 \rangle$ 方位SiNWの作製と物性計測を進めている。スピン-軌道カップリングに関する摂動アプローチやSiNWのキャリア輸送に関する軌道相互作用など、計算手法や結果の詳細は当日発表する。併せて、SiNW作製プロセスについても紹介したい。

[1] K. Nakamura, Y. Isono, and T. Toriyama, Jpn. J. Appl. Phys. **47**, 5132 (2008).

[2] C. S. Smith, Phys. Rev. **94**, 42 (1954).

[3] O. N. Tufte and E. L. Stelzer, J. Appl. Phys. **34**, 313 (1963).

[4] S. Zwerdling et al., Phys. Rev. Lett. **4**, 173 (1960).

Table 1. Piezoresistance coefficients ($\times 10^{-11} \text{ Pa}^{-1}$) in bulk Si.

n-type	π_{11}	π_{12}	π_{44}
Calc.	-55.2	30.9	-3.8
Expt. ^[2]	-102.2	53.4	-13.6
p-type	π_{11}	π_{12}	π_{44}
Calc.	2.2	-5.4	-50.6
Expt. ^[2]	6.6	-1.1	-138.1

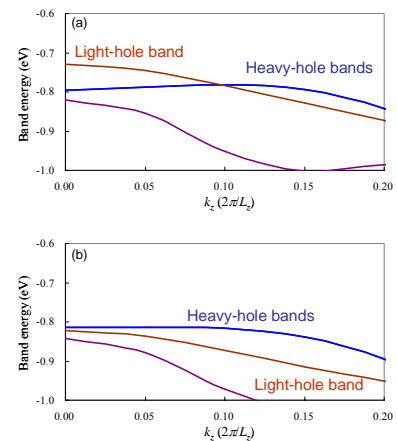


Fig. 1. Valence band structure of $\text{Si}_{89}\text{H}_{44}\langle 001 \rangle$ SiNW: (a) strain-free and (b) 1% longitudinal tensile strain.