

平成21年6月1日現在

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2006-2008

課題番号：18749006

研究課題名(和文) 原子レベルの材料特性に基づく半導体ナノスピントロニクスデバイス  
シミュレータの開発研究課題名(英文) Development of semiconductor nano-spintronics device simulator based  
on atomistic material parameters

研究代表者

相馬 聡文(SOUMA SATOFUMI)

神戸大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号：20432560

研究成果の概要：

近年の高度情報化社会の急速な発展を支えて来たシリコントランジスタの限界を超えるアプローチの一つに、電子のスピン自由度を利用した新しいエレクトロニクス-半導体スピントロニクスがある。そのような半導体スピントロニクス素子の開発において具体的な設計指針を与えるような、原子レベルの材料特性に基づいた信頼性のあるシミュレータの開発を行った。それを用いて、スピントロニクス材料の一つである狭ギャップ半導体を用いた素子、及びグラフェンナノリボン素子のシミュレーションを行い、それらにおける特性を明らかにした。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	700,000	0	700,000
2007年度	500,000	0	500,000
2008年度	500,000	150,000	650,000
年度			
年度			
総計	1,700,000	150,000	1,850,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性I

キーワード：半導体, 物性理論, 量子閉じ込め, スピンエレクトロニクス, 半導体物性

## 1. 研究開始当初の背景

現代の高度情報化社会を支える電子機器の急速な高性能化は、トランジスタなどの電子デバイスの微細化によって支えられてきたが、トランジスタの最小微細化寸法が100nm以下の技術世代を迎えるに従い、種々の物理的限界が見え始め、これまでのような微細化のみによって性能の向上を図ることが難しくなってきた。従って、今後の電子機器、電子デバイスの更なる発展の為に、これらの物理的限界を克服する為の工夫に加え、これまでの常識を超えた新しい試みによって革新的なデバイス制御を提案、確立していく事が重要である。

それに向けたアプローチの一つに、電子のスピン自由度を積極的に用いると新しいエレクトロニクス-スピントロニクス(スピントロニクス)というコンセプトがある。

具体的なスピントロニクス材料の例としては、InAsなどの狭ギャップ半導体が挙げられる。このような狭いバンドギャップを持つ半導体では、一般にスピン軌道相互作用が大きく、従って、それを利用した電流の制御が可能になる事が示唆されている。

別の材料としては、近年、単層のグラファイトであるグラフェンに大きな注目が集まっているが、このグラフェンをリボン状に加工し、グラフェンナノリボンと呼ばれる形状

にする事で、未来のトランジスタとしての可能性が生まれると共に様々な興味深い現象が起こる事が予測される。その一つが、zigzag型と呼ばれる端構造を持ったグラフェンナノリボンの端にスピンの偏極するという現象（端スピンの出現）で、これを用いた新しい素子にも期待が集まっている。

## 2. 研究の目的

以上の背景を踏まえ、本研究では、(1)InAsなどの狭ギャップ半導体を用いた量子構造における大きなスピン軌道相互作用を利用した素子、及び、(2)Zigzag端を持つグラフェンナノリボンに現れる端スピンを利用した素子、の二つに焦点を当てて研究を行った。これらに対して、具体的な研究目的を述べる。

(1)InAsなどの狭ギャップ半導体を用いた量子構造における大きなスピン軌道相互作用を利用した素子：

そのような狭ギャップ半導体を用いた量子井戸構造においては、閉じ込めポテンシャルの非対称性に起因して、Rashba型と呼ばれるスピン軌道相互作用機構が出現し、それを実験的に制御出来る事がこれまでの研究で分かっている。しかし実際には、結晶自体の持つ空間反転非対称性に起因してDresselhaus型と呼ばれる別のスピン軌道相互作用機構が出現する。従って、デバイス設計するには、これらの両者がどのように共存するのかについての詳細な理解が必要である。本研究では、Rashbaスピン軌道相互作用を応用したスピndeバイスの実験との直接比較や将来的な実用化を見据えた立場から、原子レベルの材料特性を考慮に入れたタイトバインディング法を用い、実用的なスピントロニクスデバイスシミュレータの開発及びデバイス特性に関する研究を目的とする。

(2)Zigzag端を持つグラフェンナノリボン(Z-GNR)に現れる端スピンを利用した素子：

Zigzag型の端構造を持ったグラフェンナノリボン(Z-GNR)の端にスピンの偏極するという現象（端スピンの出現）が理論的に予測されているが、このような現象について信頼性のあるシミュレーションを行う為に、段階を踏んで、まずはスピン偏極が存在しない場合のzigzag端グラフェンナノリボン(Z-GNR)の電気伝導の研究を行う。特に、Z-GNRの電流方向に有限なバイアスが印加された場合に関する詳細な研究が必要である。又、実験的には欠陥の無いGNRを作成する事は難しいと考えられる為、リボンの端に格子欠陥が存在する場合などについても

詳細な研究が必要である。

これらの理解を踏まえた上で、更に、電子間の交換相関相互作用における電子のスピン依存性に起因してZ-GNRの端にスピンの偏極する場合について、その信憑性について再確認を行い、これを用いた新規素子の可能性を探る。

## 3. 研究の方法

研究の目的で述べた(1)InAsなどの狭ギャップ半導体を用いた量子構造における大きなスピン軌道相互作用を利用した素子、(2)Zigzag端を持つグラフェンナノリボンに現れる端スピンを利用した素子、の両者共に、その現象の本質の理解、信頼性のあるシミュレーションを行う為には、原子レベルからのシミュレーションが必要である。具体的には、電子が素子を構成する原子に強く束縛されているとする強結合近似法（タイトバインディング法）を採用し、素子内の電子の波動関数を、原子軌道関数（Atomic Orbital）の重ね合わせとして表現する、所謂 Linear Combination of Atomic Orbital (LCAO)法を用いる。

更に、素子に電流が流れている事、即ち素子が非平衡状態になっている事を正確に取り入れるため、非平衡グリーン関数法（Non-equilibrium Green's function method: NEGF法）を用いる。

強結合近似法（タイトバインディング法）の具体的な形としては、(1)の狭ギャップ半導体を用いた量子構造のシミュレーションの為に、より効率的なシミュレーションを行う為、原子一個当たり5つの軌道(sp3s\*基底セット)と原子内のスピン軌道相互作用を仮定した経験的強結合近似を採用し、(2)のZigzag端を持つグラフェンナノリボンに現れる端スピンを利用した素子のシミュレーションの為に、グラフェンナノリボンのバンド構造をより正確に得、又、電子間の交換相関相互作用におけるスピン依存性を取り入れるため、スピン密度汎関数に基づいた強結合近似法、スピン密度汎関数タイトバインディング法（Spin-Density-functional tight-binding method: DFTB法）を用いる。

このように、二つの目的に異なる強結合近似法を用いるが、シミュレーションプログラムの本体部分は共通であり、従って、様々なスピン依存伝導現象に適用できる汎用的なスピントロニクスシミュレータの開発を目的としている。

## 4. 研究成果

(1)InAsなどの狭ギャップ半導体を用いた量子構造における大きなスピン軌道相互作用を利用した素子：

この研究における具体的材料、素子構造と

して、①GaAs/InAs、或いは②AlSb/InAs からなる2重障壁共鳴トンネル素子構造を考えた。つまり、井戸層及び電極にはInAsを仮定し、障壁層の材料としては①GaAsの場合と②AlSbの場合を考察した。

### ①GaAs/InAs 共鳴トンネル素子構造

まず、素子に電界が印加されていない場合を考える。InAs量子井戸における量子準位に起因して素子の透過確率に共鳴ピークが得られるが、量子井戸面内の波数が有限の場合、この共鳴ピークがスピンの向きに依存して2つのピークに分裂する事、即ちゼロ磁場スピン分離が確認された。これは結晶の空間反転非対称性、即ちDresselhaus機構によるものである。更に、素子の輸送方向に電界を印加した場合、そのゼロ磁場スピン分離が増大し、さらにそれは面内の波数の向きに依存して変化する。これは、構造反転非対称性によるスピン軌道相互作用(Rashba機構)とDresselhaus機構が共存している事を示す。これらより、本研究で用いた原子レベルの解析アプローチによってスピン軌道相互作用によるゼロ磁場スピン分離を正確にシミュレーションできる事が分かった。

### ②AlSb/InAs 共鳴トンネル素子構造

この場合、AlSb障壁層とInAs井戸層でanion原子が異なる。その為、結晶界面構造が一意的でなく、InSb的な界面(図1上(a))とAlAs的な界面構造(図1上(b))との両方が考えられる。このような区別はGaAs/InAs系のようにAnion原子が障壁と井戸で共通の場合には起こらない。我々の計算の結果、①のGaAs/InAsの場合でも得られていたゼロ磁場スピン分離の特性が、界面構造に依存して全く異なる事が明らかとなった。ここでは、全ての界面がAlAs的な場合を考える。下図に、電流方向に電界を印加していない場合での透過確率とx, y, z方向それぞれのスピン偏極率のエネルギー依存性を示す。2つのグラフで、面内の波数の方向が異なる(大きさは同じ)。図に示すように、面内の波数の角度がゼロ(x軸に平行)の場合、共鳴ピークのスピン分離が得られるが、量子井戸の面内波数の角度がx軸から45度傾いている場合、スピン分離が得られない。これは、電界がゼロ(つまりRashba機構が無い場合)でもスピン分離に異方性が合われている事を意味し、通常のDresselhaus機構だけでは説明が出来ない。これは、Anion原子が共通でないAlSb/InAs界面の影響によって新たなスピン軌道相互作用が作用した為であると解釈されるが、この現象のより深い理解の為にはさらなる研究が必要である。ここで

行った原子レベルからのゼロ磁場スピン分離の研究は世界にあまり例が無く、又、そこから得られる知見は非常に大きい。今後はこの計算を更に発展させ、国内外の実験グループへの情報提供を行っていく。

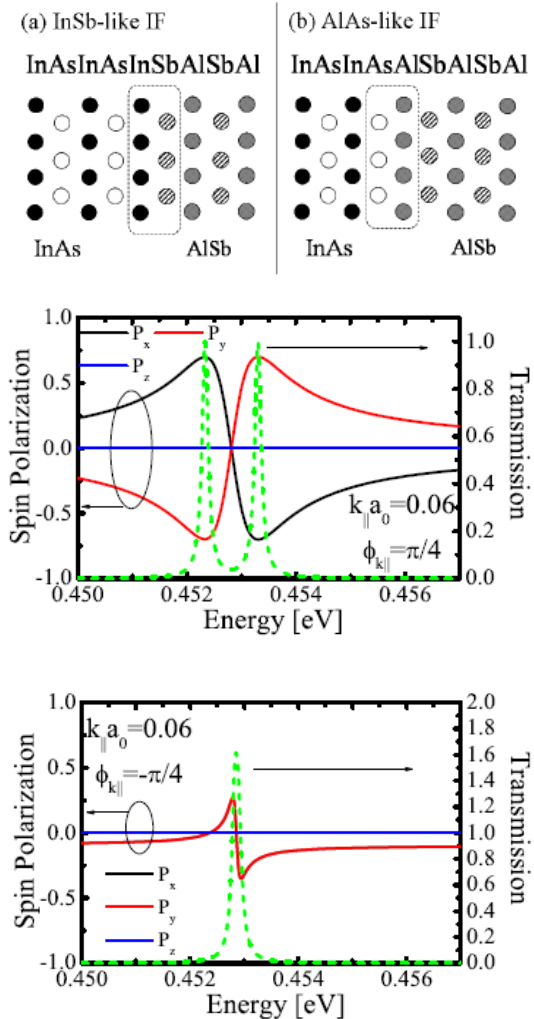


図1. 上: AlSb/InAs 共鳴トンネル素子構造における界面(Interface: IF)構造. 中, 下: 透過確率とx, y, z方向それぞれのスピン偏極率のエネルギー依存性

### (2) Zigzag端を持つグラフェンナノリボン(Z-GNR)に現れる端スピンを利用した素子:

この研究においては、無限に長いZ-GNRを仮定し、その中央部分がチャンネル領域、その左右の反無限部分がn型にドーパされたソース/ドレイン電極領域とし、中央のチャンネル領域に印加する電界によって電流を制御するトランジスタ構造を考える。このZ-GNRトランジスタ素子において、電子間の交換相互作用におけるスピン依存性の結果として①スピンが偏極していない場合、②スピンが偏極している場合、の両方が考えられ、それらのどちらかが安定的に存在しうるかを注意深く考察する必要がある。そこでまず、

これらの2つの場合に分けて考察した。

①スピン偏極が存在しない場合

前述の Z-GNR トランジスタ素子において、スピン偏極が存在しない場合について考察した結果、Z-GNR の太さに依存して全く異なる特性が得られる事が明らかとなった。

Z-GNR の太さは、幅方向に数えた zigzag なラインの数  $N$  として表現され、 $N$  が奇数の場合と偶数の場合で全く異なる特性が得られる。前述の Z-GNR トランジスタ素子においてチャンネル部分に電界を印加した場合、 $N$  が偶数の場合には、電界を変化させても電流は殆ど変化しない事が分かった。これは、Z-GNR においてバンドギャップがゼロである事に起因している、しかし、幅  $N$  が偶数の場合、チャンネル部分に印加する電界を変化させると、通常の半導体トランジスタに類似の電流のスイッチング特性が得られる事が明らかとなった。これは、偶数幅の Z-GNR における幅方向の幾何学的対称性に起因する現象である。

更に、電流方向のソースドレイン間電圧を変化させると、ある一定以上の電圧で電流が飽和するという特性が明らかとなった (図2)。

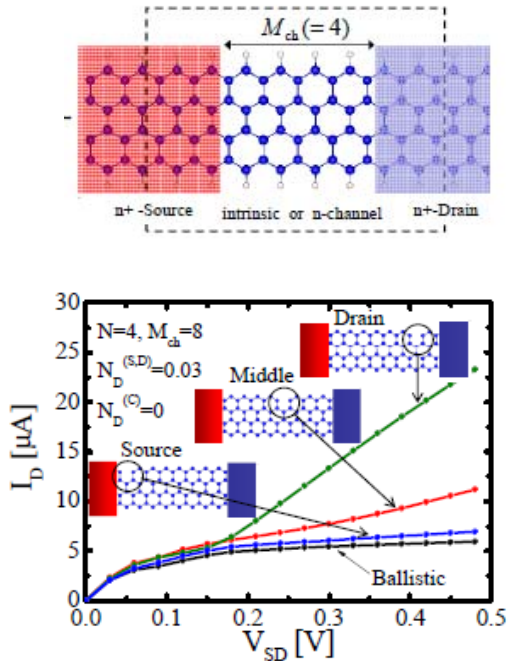


図2. 上:Z-GNR 素子の概念図. 下:Z-GNR における電流のソースドレイン間電圧依存性. 様々な格子欠陥位置に対する結果を示す.

これらの結果は、偶数幅の Z-GNR においては、バンドギャップがゼロであるにも関わらずバンドギャップの開いた半導体に類似

の特性を持つという事を意味し、非常に興味深い。更にリボンの端に格子欠陥が存在する場合について調べた結果、欠陥の位置によって電流電圧特性に大きな違いが現れる事が明らかとなった (図2)。これも偶数幅の Z-GNR の持つ特異な性質である。

②スピン偏極が存在すると仮定した場合

Z-GNR におけるスピン偏極を仮定した場合、従来の研究と同じく、リボンの対向する端に逆向きのスピンが偏極する状態が安定となる事が確認された。これは、Z-GNR においては元々フェルミ面において端に局在した電子状態 (端状態) が存在し、その大きな状態密度の為に磁性が出現したものと考えられる。本研究では、この端にスピン偏極した Z-GNR をチャンネルとしたトランジスタ構造を提案し、シミュレーションを行った。詳細には、ソース/ドレイン電極として、n型にドーパされた Z-GNR を考え、チャンネル部分にはノンドープの Z-GNR を考える。さらにチャンネル部分の Z-GNR には、サイドゲート電極によって幅方向に電界を印加出来るとする (図3上)。計算の結果、サイドゲート電圧を調整する事で電流のスピン偏極を制御出来る事が示された (図3下)。これは Z-GNR を用いて特定のスピンだけを通過させる素子—スピンフィルター素子—が実現可能である事を示している。

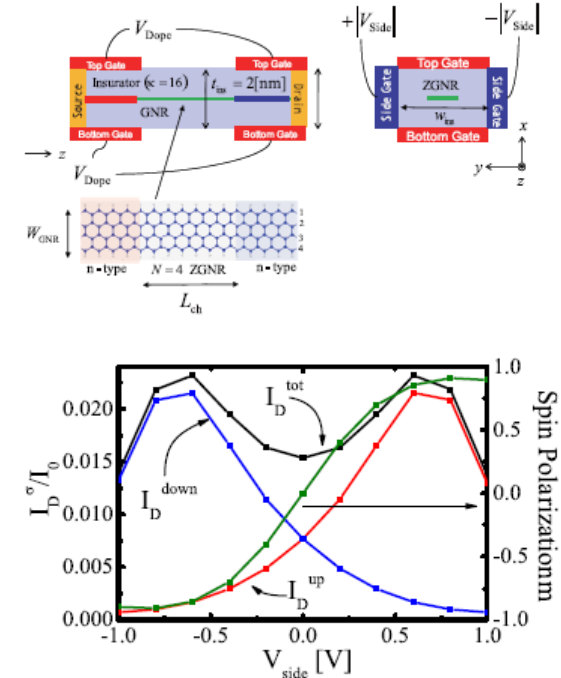


図3. 上:Z-GNR スピンフィルター素子の概念図. 下:スピン依存電流のサイドゲート電圧依存性.

大きな実験的発展が予想される。今後は、GNR素子の実用化を念頭に、実験グループと協力して、これまでの研究成果を発展させ、電極構造の取り扱いなどをより現実的に考慮したシミュレーションを進めていく必要がある。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計9件)

①S. Souma, M. Ogawa, T. Yamamoto, and K. Watanabe, Influence of edge roughness on the performance of graphene nano-ribbon devices, Proceedings of International Meeting for Future of Electron Devices, Kansai (IMFEDK) 2009, pp. 40-41 (2009) 査読有り

②S. Souma, M. Ogawa, T. Yamamoto, and K. Watanabe, Simulation of graphene nanoribbon spin-filter device with spin-density functional tight-binding method, Proceedings of the 13<sup>th</sup> international workshop on computational electronics, pp. 81-84 (2009) 査読有り

③S. Muraoka, S. Souma, and M. Ogawa, Analysis of direct tunneling current from quasi-bound states in n-MOSFET based on non-equilibrium Green's function Proceedings of 2008 Int. Conf. on Simulation of Semiconductor Processes and Devices pp. 221-224 (2008) 査読有り

④相馬聡文, 小川真人, 山本貴博, 渡辺一之  
グラフェンナノリボンを用いた新規デバイスの提案とシミュレーション  
シリコンテクノロジー No.103, pp. 15-20 (2008)  
査読無し

⑤S. Souma, M. Ogawa, T. Yamamoto, and K. Watanabe, Numerical Simulation of Electronic Transport in Zigzag-Edged Graphene Nano-Ribbon Devices, Journal of Computational Electronics, Vol.7, No. 3 pp.390-393 (2008) 査読有り

⑥H. Fitriawan, M. Ogawa, S. Souma, and T. Miyoshi, Non-equilibrium Green's function method for modeling quantum electron transport in nano-scale devices with anisotropic multiba

nd structure, J. Mat. Sci.: Materials in Electronics, Vol.19, No.2, pp.107-110 (2008) 査読有り

⑦H. Fitriawan, M. Ogawa, S. Souma, and T. Miyoshi, Quantum electron transport modeling in uniaxially strained silicon channel of double-gate MOSFETs, Phys. Stat. Sol. (c), Vol.5, No.1, pp.74-77 (2008) 査読有り

⑧H. Fitriawan, M. Ogawa, S. Souma, and T. Miyoshi, Fullband simulation of nano-scale MOSFETs based on a non-equilibrium Green's function method, IEICE Trans. Electron., Vol.E91-C, No.1, pp. 105-109(2008) 査読有り

⑨H. Fitriawan, M. Ogawa, S. Souma, and T. Miyoshi, Quantum electron transport modeling in double-gated MOSFETs based on multiband non-equilibrium Green's function method Physica E, Vol.42, Issue 2, pp. 245-248 (2007) 査読有り

[学会発表] (計14件)

①S. Souma, M. Ogawa, T. Yamamoto, and K. Watanabe, Influence of edge roughness on the performance of graphene nano-ribbon devices, International Meeting for Future of Electron Devices, Kansai (IMFEDK) 2009 . Kansai University, Japan, 2009/5/15

②相馬聡文, 小川真人, 山本貴博, 渡辺一之  
ナノグラフェン素子における電流のスピン偏極制御に関する理論解析  
応用物理学会第56回応用物理学関係連合講演会, 筑波大学, 2009/4/1

③相馬聡文, 小川真人  
狭ギャップ半導体共鳴トンネル素子のスピン依存伝導における界面構造の影響  
日本物理学会 第64回年次大会, 立教大学, 2009/3/27

④S. Souma, M. Ogawa, T. Yamamoto, and K. Watanabe, Spin Dependent Transport in Graphene Nano Ribbon Devices  
American Physical Society March Meeting, Pittsburgh USA, 2009/3/16

⑤S. Souma, M. Ogawa, T. Yamamoto,

and K. Watanabe,  
Computational modeling of graphene nano-ribbon spin devices based on spin-density-functional tight-binding method  
Int. Symposium on Graphene Devices,  
Aizu University, Japan, 2008/11/18

⑥相馬聡文, 小川真人, 山本貴博,  
渡辺一之  
グラフェンナノリボン素子におけるスピン輸送に関する理論解析  
日本物理学会2008秋季大会, 岩手大学,  
2008/9/22

⑦相馬聡文, 小川真人, 山本貴博,  
渡辺一之  
グラフェンナノリボン FET の数値シミュレーション  
電気学会「超集積化・環境CMOSデバイス調査専門委員会」「化合物半導体電子デバイス調査専門委員会」合同委員会「電子デバイス応用に向けたグラフェンの現状と将来展望」,  
早稲田大学大久保キャンパス, 2008/7/25

⑧相馬聡文, 小川真人, 山本貴博,  
渡辺一之  
グラフェンナノリボンを用いた新規デバイスの提案とシミュレーション  
応用物理学会シリコンテクノロジー分科会モデリング研究会「シリコンCMOSを超えるフロンティアデバイスのモデリング」(2008)  
機械振興会館, 2008/7/11

⑨相馬聡文, 小川真人, 山本貴博,  
渡辺一之  
ナノグラフェン素子における量子輸送シミュレーション  
第55回応用物理学関係 連合講演会, 日本大学理工学部 船橋キャンパス, 2006/3/28

⑩H. Fitriawan, S. Souma and M. Ogawa,  
Fullband Green's function study for quantum electron transport in strained silicon n-MOEFETs  
12th Int. Workshop on Computational Electronics (2007) University of Massachusetts, Amherst, USA, 2007/10/9

⑪S. Souma, M. Ogawa, T. Yamamoto, and K. Watanabe,  
Numerical simulation of the electronic transport in graphene nano-ribbon devices  
12th Int. Workshop on Computational Electronics (2007), University of Massachusetts, Amherst, USA, 2007/10/9

⑫相馬聡文, 小川真人, 山本貴博,

渡辺一之  
グラフェンナノリボン素子のトランジスタ特性に関する理論的研究  
日本物理学会 2007 年次 大会, 北海道大学札幌キャンパス  
(2007/9/24)

⑬S. Souma and M. Ogawa  
Atomistic simulation of spin-polarized electronic current in resonant tunneling heterostructures  
4th International School and Conference on Spintronics and Quantum Information Technology (Spintech IV), Maui, Hawaii USA, 2007/6/21

⑭相馬聡文, 小川真人, 山本貴博,  
渡辺一之  
グラファイトリボンの電気伝導におけるゲート電極の効果  
日本物理学会 2007 年 春季大会 鹿児島大学郡元キャンパス 2007/3/20

[図書] (計 2 件)

①B. K. Nikolic, L. P. Zarbo, and S. Souma  
Oxford University Press  
“Spin currents in semiconductor nanostructures: A nonequilibrium Green function Approach”  
Book chapter in “Oxford Handbook of Nanoscience and Technology: Frontiers and Advances, edited by A. V. Narlikar and Y. Y. Fu. Chapter ページ数 49ページ. (2009出版予定)

②三好旦六, 小川真人, 土屋英昭  
(5章3節分担執筆者: 相馬聡文)

培風館  
ナノエレクトロニクスの基礎, 2007 年  
11 月 2 日発行 pp. 192-209

## 6. 研究組織

(1) 研究代表者  
相馬 聡文 (Satofumi Souma)  
神戸大学・大学院工学研究科 准教授  
研究者番号: 20432560

(2) 研究分担者  
無し

(3) 連携研究者  
無し