

平成 22 年 5 月 1 日現在

研究種目： 若手研究(B)
研究期間： 2008 ～ 2009
課題番号： 20760221
研究課題名（和文） ナノスケール構造での電子音響フォノン相互作用エンジニアリングの開拓
研究課題名（英文） Research on Electron-Acoustic Phonon Interaction Engineering in Nanoscale Structures.
研究代表者
宇野 重康 (SHIGEYASU UNO)
名古屋大学・大学院工学研究科・助教
研究者番号： 40420369

研究成果の概要（和文）：

室温動作を前提とした電子デバイスの多くでは、電子と音響フォノン（熱振動をエネルギー源とする弾性波）の散乱現象がデバイス性能を左右する。一方、近年のデバイスは異なる硬さの材料によるナノスケール構造体であり、音響フォノンは単一材料内のものとは異なる複雑かつ興味深い性質を持つ。本研究は、このような変調された音響フォノンがデバイス中での電子・音響フォノン散乱に与える影響を詳細に解析し、デバイス性能予測手法を開発した。

研究成果の概要（英文）：

In most of the electronic devices under room temperature operation, device performance is strongly influenced by the electron scattering due to acoustic phonons (thermally-generated elastic waves in solids). Recent devices are inherently nanoscale composite structures of materials with different elastic properties, so that the acoustic phonons are different from those in bulk materials. In this work, we investigated the impact of such acoustic phonon modulation on electron-acoustic phonon scattering.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008 年度	800,000	240,000	1,040,000
2009 年度	800,000	240,000	1,040,000
年度			
年度			
年度			
総計	1,600,000	480,000	2,080,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：電気電子工学・電子デバイス・電子機器

キーワード：音響フォノン、電子フォノン相互作用、電子移動度

1. 研究開始当初の背景

近年の半導体素子は硬さの異なる材料のナノスケール複合体と見なすことができる。中でも最も広くみられるのはシリコン (Si) とその酸化物 (SiO₂) の微細構造であり、室

温における電気特性は電子と固体熱振動に起因した弾性波である音響フォノンとの相互作用から強く影響を受ける。このような硬さの異なる材料の混在した構造では音響フォノン波が変調を受けることが知られてい

るが（音響フォノン変調）、それが電子デバイス性能に与える影響や物理メカニズムについての理解は未だ乏しい。

2. 研究の目的

以上のような背景のもと、本研究では以下の三つの視点から詳細な研究を行った：(1) ナノスケール半導体微細構造における変調音響フォノンと電子の相互作用の物理理解を深化する、(2) 音響フォノン変調のデバイス性能に対する影響を調査する、(3) 以上の知見に基づいたデバイス性能向上の指針を提案する。対象とする構造は板およびナノワイヤ構造で、単一材料によってなる板またはワイヤが真空中に自立したもの（自立構造）と、その周囲を異なる絶縁材料が取り囲んだもの（被覆・埋め込み構造）を取り扱った。

3. 研究の方法

研究の第一歩は、与えられたナノスケール構造の中での音響フォノンを求める事から始まる。音響フォノンとは熱振動をエネルギー源とする弾性体の波動（弾性波）であり、波長が弾性体を構成する原子間距離に比べて十分大きなものを指す。音響フォノンは通常我々が知覚する弾性波である地震・音波などに比べて遙かに微弱なエネルギーを持った波動であるが、地震などと同じく Navier 方程式という波動方程式によって記述される。与えられたナノスケール構造中での定常波を計算する事により、音響フォノンのもつエネルギーと波長の関係や波動形状など以降の計算で必要となるあらゆる物理量を求める事ができる。

次に、電子と音響フォノンの相互作用を計算する。音響フォノンを水面の波にたとえると、電子はそこを走る船だと考えればよい。電子は音響フォノンを吸収したり放出したりして進路を変える。その相互作用は量子力学によって記述され、時間依存摂動法から導き出される Fermi 黄金律に基づいて電子状態の遷移確率を計算することができる。我々は板およびワイヤ構造での遷移確率を計算し、それを元に電子散乱レート（単位時間あたりの散乱回数）、電子移動度（電子の移動しやすさで電気抵抗と直接関係する物理量）を計算した。

最後に以上の計算結果を詳細に解析し、電子・音響フォノン相互作用を低減するためにどのような構造が望まれるのか、音響フォノン変調によるデバイス性能変化がどのような物理量によって特徴付けられるのか、といった考察を行った。

4. 研究成果

本研究により次の主な成果が得られた。

(1) 音響フォノン変調による遷移確率・散乱レート・電子移動度への影響を一手に引き受ける物理量を明らかにした。具体的には、「形状因子」と呼ばれる電子波動関数と音響フォノン波動関数の重なり積分に、音響フォノンが変調される事による効果を全て集約するという新しい定式化手法を開発した。例えば板構造の形状因子は次式で与えられる。

$$I_{n,n'}(\mathbf{Q}) = \sum_{\sigma, q_l} \rho L_x L_y |C_l|^2 \left| \langle n' | (e^{iq_l z} + \sigma e^{-iq_l z}) | n \rangle \right|^2,$$

ただし \mathbf{Q} はフォノン波数（フォノン波長の逆数に 2π を掛けたもの）の板面内成分、 ρ は質量密度、 $L_x L_y$ は板の面積、 C_l は変調音響フォノン縦波成分の振幅、 q_l はフォノン波数の板に垂直な成分、 σ はフォノン波の対象性を表す量、そして n, n' は散乱前後の電子状態を表す。これにより、散乱レートや電子移動度を用いた解析に比べて格段に物理現象解析を容易にすることができた。

(2) 自立構造の形状因子が構造にも材料にもよらない普遍性を持つことを明らかにした。具体的には、形状因子に含まれるフォノン波数および形状因子そのものを適切に規格化することで、構造定数（板の場合は厚み、ワイヤでは半径）にも材料定数（質量密度、Young 率、Poisson 比）にもよらない統一的な曲線が得られる事を示した。またこの発見により、自立構造での音響フォノン変調が電子・音響フォノン相互作用に及ぼす影響の強さが、Young 率と Poisson 比から算出される材料定数である Lamé 定数 λ, μ を用いた次のパラメータによって特徴付けられる事を見いだした：

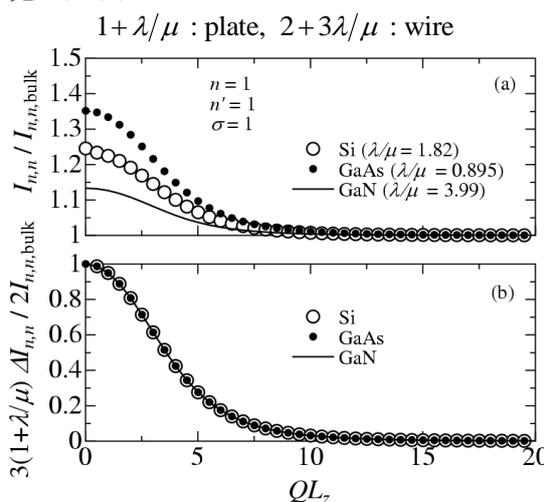


図1 異なる材料 (Si, GaAs, GaN) の自立板構造に対して計算された普遍的形状因子（雑誌論文⑤より引用）。(a) 縦軸規格化前、(b) 規格化後。形状因子 I 、フォノン波数 Q 、板厚 L_z

(3) 自立構造の変調音響フォノン律速電子移動度コンパクトモデルを開発した。具体的には、変調音響フォノンとの散乱によって決定される電子移動度を簡易な陽関数で表した。これにより、変調音響フォノンに関する一切の専門知識・数値計算なしに音響フォノン変調効果を取り入れた電子移動度を誰でも簡単に計算する事が可能になった。

(4) 板・ワイヤでの自立構造及び埋め込み構造での電子移動度を比較し、自立構造のほうがより強く音響フォノン変調の影響を受けることを明らかにした。これは、界面でのフォノン振動が自立構造での場合に最も強くなるためであると考えられる。

(5) 埋め込み構造においては、板・ワイヤを取り囲む絶縁材料の「硬さ」を表す音響インピーダンスという物理量が音響フォノン変調効果を左右することを明らかにした。具体的には、絶縁材料の音響インピーダンスが板・ワイヤのものに比べて大きいときは音響フォノン変調が抑制され、小さい時は助長されることを確認した。このことは、電子デバイスにおける電子・音響フォノン散乱を抑制するためには、電子が存在する領域の周辺を大きな音響インピーダンスをもつ絶縁材料で取り囲めばよいことを示唆している。例えばシリコンの板・ワイヤであれば、周囲を取り囲む材料を酸化シリコン (SiO_2) とするよりもハフニウム酸化物 (HfO_2) やサファイア (Al_2O_3 の変種) とした方が、電子・音響フォノン散乱は小さくなると予想される。

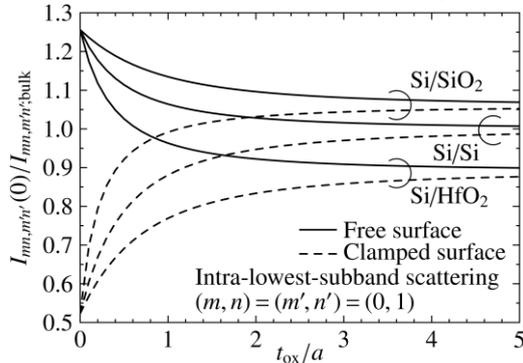


図 2 Si ナノワイヤ周辺を異なる絶縁材料 (SiO_2 , Si, HfO_2) で被覆したときの形状因子の被覆膜厚依存性 (雑誌論文③より引用)。縦軸はバルクフォノンを用いて計算された形状因子に対する比。図中では合わせて絶縁層外側での境界条件による違いも比較している。

以上のような主な成果およびその他の副次的な諸発見により、板・ワイヤ構造における電子と変調音響フォノンの相互作用に関する理解を前進させることができた。以上の成果を基盤とすることにより、今後つぎのような発展が可能である：

(1) 量子ドット構造の計算。具体的には、

量子コンピュータ素子としての二重量子ドット内における電子コヒーレント時間への音響フォノン変調が及ぼす影響を調査するなど。

(2) ナノワイヤ超格子構造への拡張。具体的には、ナノワイヤの軸方向に周期的な構造変調を加えることによる音響フォノン変調と電子・変調音響フォノン相互作用を調査すること。応用例として、電子・音響フォノン変調を積極的に制御することによる新しい電子デバイスや、熱電変換素子におけるフォノン輸送・電子輸送の制御などが考えられる。

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 5 件)

- ① Shigeyasu Uno, Junichi Hattori, Kazuo Nakazato, and Nobuya Mori “Form Factor Increase and Its Physical Origins in Electron-Modulated Acoustic Phonon Interaction in a Free-standing Semiconductor Plate”, *Mathematical and Computer Modeling*, 査読有, vol. 51, pp. 863-872 (2010).
- ② Junichi Hattori, Shigeyasu Uno, Nobuya Mori, and Kazuo Nakazato “Universality in Electron-modulated-acoustic-phonon Interactions in a Free-standing Semiconductor Nanowire”, *Mathematical and Computer Modeling*, 査読有, vol. 51, pp. 880-887 (2010).
- ③ Junichi Hattori, Shigeyasu Uno, Nobuya Mori and Kazuo Nakazato “Electron-Modulated-Acoustic-Phonon Interactions in a Coated Silicon Nanowire” *Jpn. J. Appl. Phys.* 査読有, vol. 49, p. 04DN09 (2010).
- ④ Junichi Hattori, Shigeyasu Uno, Nobuya Mori and Kazuo Nakazato “Scaling Consideration and Compact Model of Electron Scattering Enhancement due to Acoustic Phonon Modulation in an Ultrafine Free-Standing Cylindrical Semiconductor Nanowire” *J. Appl. Phys.* 査読有, vol. 107, p. 033712 (2010).
- ⑤ Shigeyasu Uno, Darryl Yong, and Nobuya

Mori “Sum Rules and Universality in Electron-Modulated Acoustic Phonon Interaction in a Free-standing Semiconductor Plate” Phys. Rev. B, 査読有、vol. 79, pp. 235328-235335 (2009).

[学会発表] (計 10 件)

- ① 服部淳一, 宇野重康, 森 伸也, 中里和郎, “シリコン量子細線 MOSFET における電子-変調音響フォノン相互作用のゲート電圧依存性に関する理論研究”, 春季第 57 回応用物理学関係連合講演会, 神奈川(2010 年 3 月 18 日) 18a-C-1.
- ② (Invited) Shigeyasu Uno, Junichi Hattori, Kazuo Nakazato, and Nobuya Mori, “Acoustic Phonons and Their Interaction with Electrons in Si Nanostructures”, 2010 International Symposium on Atom -scale Silicon Hybrid Nanotechnologies for ' More-than-Moore' and ' Beyond CMOS' Era, Southampton, United Kingdom (2010 年 3 月 1-2 日).
- ③ (Invited) N. Mori, H. Minari, S. Uno, H. Mizuta, and N. Koshida, “Electron-Phonon Interaction and Quasi-Ballistic Transport in Silicon Nanodots”, 2010 International Symposium on Atom -scale Silicon Hybrid Nanotechnologies for ' More-than-Moore' and ' Beyond CMOS' Era, Southampton, United Kingdom (2010 年 3 月 1-2 日).
- ④ Junichi Hattori, Shigeyasu Uno, Nobuya Mori and Kazuo Nakazato “A Theoretical Study of Electron-Modulated-Acoustic-Phonon Interactions in Silicon Nanowire MOSFETs”, International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2009), Sendai, Japan (October 7-9 2009), E-7-3.
- ⑤ 服部淳一, 宇野重康, 森 伸也, 中里和郎 “埋め込み Si 量子細線における電子-変調音響フォノン相互作用に関する理論研究”, 秋季第 70 回応用物理学学術講演会, 富山市(2009 年 9 月 8 日) 8p-TB-13.
- ⑥ N. Mori, H. Minari, S. Uno, H. Mizuta,

and N. Koshida, “Quasiballistic electron transport through silicon nanocrystals”, 16th International Conference on Electron Dynamics In Semiconductors, Optoelectronics and Nanostructures, Montpellier, France (August 24-28, 2009), Th-P9.

- ⑦ Shigeyasu Uno, Kazuo Nakazato, and Nobuya Mori, “Acoustic Phonons and their Influence on Electron-Phonon Scattering in an Ultra-thin Semiconductor Film”, 2009 Silicon Nanoelectronics Workshop, Kyoto (June 13-14, 2009), 7-2.
- ⑧ 服部淳一, 宇野重康, 森 伸也, 沼田達宏, 中里和郎 “自立シリコン量子細線における電子-変調音響フォノン相互作用に関する理論研究”, 秋季第 69 回応用物理学学術講演会, 春日井市 (2008 年 9 月 3 日) 3p-P11-4.
- ⑨ S. Sawai, S. Uno, M. Okamoto, Y. Tsuchiya, S. Oda and H. Mizuta “Atomistic study of phonon states in hydrogen-terminated Si ultrathin films”, 2008 Silicon Nanoelectronics Workshop, Hawaii, USA (Sept. 15-16, 2008), M0200.
- ⑩ 服部淳一, 宇野重康, 森伸也, 沼田達宏, 中里和郎, “自立半導体量子細線における電子-変調音響フォノン相互作用に関する理論研究”, 春季第 56 回応用物理学関係連合講演会, 筑波市(2009 年 3 月 31 日) 31a-V-1.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

宇野 重康 (SHIGEYASU UNO)
名古屋大学・大学院工学研究科・助教
研究者番号：40420369

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

森 伸也 (NOBUYA MORI)
大阪大学・大学院工学研究科・准教授
研究者番号：40420369