29p-PB3-4

高濃度ドープ Si のゼーベック係数の計算

Calculation of Seebeck Coefficient of Heavily Doped Silicon

阪大院工 [1], JST-CREST[2] ○ 鎌倉 良成 [1,2], インドラ ヌル アディスシロ [1], 久木田 健太郎 [1]

Osaka Univ.[1], JST-CREST[2] ○Yoshinari Kamakura[1,2], Indra Nur Adisusilo[1], and Kentaro Kukita[1]

E-mail: kamakura@si.eei.eng.osaka-u.ac.jp

【はじめに】Seebeck 効果による熱電変換技術は、環境発電の 1 つの選択肢として注目されている。LSI 用の電源を想定した場合、CMOS プロセスとの親和性も重要なファクタであり、Si や poly-Si といった材料の熱電特性のより深い理解も望まれている [1]。変換効率の最適化には、10^{18}–10^{19} cm^{-3} といった比較的高濃度のドーピングを行う必要がある。だが、これら領域の Seebeck 係数の振る舞いについては、キャリア濃度依存性に対する特異なピークが最近見出されるなど [2]、未だ完全には解明されていない。今回は、TCAD 用にキャリブレーションされた高濃度ドープ Si のモデル [3] を用いて Seebeck 係数を求め、そのドーピング濃度依存性についての議論を試みる。【計算方法】Altermatt ら [3] によって報告された高濃度ドープ Si に対する状態密度 (DOS) モデルをもとに、Boltzmann 輸送方程式の線形化に基づく標準的な公式 [4] から Seebeck 係数を算出した。簡単のため、緩和時間は一定 ($\tau(E) = 1$ ($E > E_c$), $= 0$ ($E < E_c$)) とした。【結果と考察】Fig. 1 は、n-Si の DOS のエネルギー依存性である (P 濃度 $N_{dop} = 3.9 \times 10^{18}$ cm^{-3})。本モデルでは、ドーパントによる不純物バンド、および伝導帯端のテイリングが考慮されており、さらに N_{dop} のうち、実際に束縛状態を形成するドーパントの割合 $b(N_{dop})$ についても、様々な実験値との比較から調整されている。Fig. 2 は、Seebeck 係数の N_{dop} 依存性である。比較のため、不純物状態を考慮せず伝導帯 DOS ($\propto \sqrt{E}$) のみから算出した結果も示した (黒破線)。モット転移濃度 ($N_{crit} \sim 3.74 \times 10^{18}$ cm^{-3}) 付近において、両者に乖離が見られるが、これは不純物バンドの存在による Fermi エネルギーの位置 E_F の相違から説明できる。すなわち、低濃度領域ではドーパントは完全にイオン化しているが、E_F が伝導帯端に近づくとイオン化率は低下し、不純物バンドの影響が見えてくる。しかし、高濃度領域では、不純物バンドの減衰 ($b < 1$) のため、その Seebeck 係数への影響は無視できるようになる。【謝辞】本研究の一部は文科省科研費 (22560330) からの支援を受けて実施された。

[1] J. Xie et al., J. Micromech. Microeng. **19** (2009) 125029. [2] H. Ikeda et al., Appl. Phys. Lett. **96** (2010) 012106. [3] P. P. Altermatt et al., J. Appl. Phys. **100** (2006) 113714. [4] G. Chen, *Nanoscale Energy Transport and Conversion* (Oxford University Press, New York, 2005).

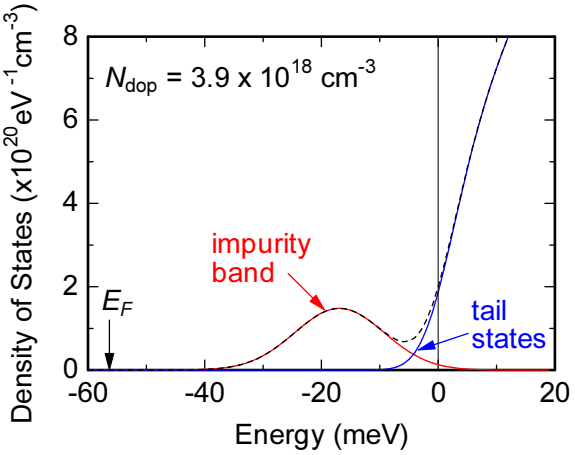

Fig. 1: Density of states of phosphorus doped silicon calculated with the model of Ref. [3].

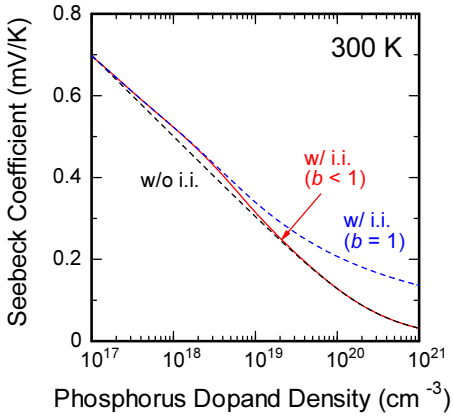

Fig. 2: Calculated Seebeck coefficient of silicon with and without taking account of the incomplete ionization (i.i.).

© 2013 年　応用物理学会