

## B および P をドーピングした Si 量子ドットの電子状態

## Electronic properties of B- and/or P-doped Si quantum dots

富士通研究所 °金田 千穂子

FUJITSU LABORATORIES Ltd., °Chioko Kaneta

E-mail: kaneta.chioko@jp.fujitsu.com

【はじめに】Si 量子ドットは、地球上に豊富に存在する Si が主材料であること、サイズやドーパントの選択により、光学的あるいは電気的特性の制御が可能であることなどから、次世代太陽電池、発光デバイス、電子デバイスなどの構成要素として注目を集めている。これらの特性は主にエネルギーギャップ近傍の電子状態に支配されるため、ドットのサイズやドーパントによる電子状態の変化を知ることは重要である。

【モデルおよび計算方法】直径 1.1nm および 2.4nm の水素終端された Si 量子ドットに B および P をドーピングしたものをモデルとして用い、これらの電子状態が量子ドットのサイズとドーパントの種類や量でどのように変化するかを調べた。計算には密度汎関数法を用い、スピン分極を考慮した。計算プログラムは PHASE を利用した。

【結果】Si 量子ドットの中心に単一の B あるいは P をドーピングすると、これらはそれぞれ Si 量子ドット本来の HOMO の高エネルギー側あるいは LUMO の低エネルギー側に不純物準位を形成する。B と P をドットの中心付近に同時にドーピングした場合、エネルギーギャップの下端 (HOMO) および上端 (LUMO) の準位はそれぞれ B および P 由来であり、元の不純物準位の特徴を残している。図に直径 1.1nm の Si 量子ドットに対する結果を示す。この場合の準位の位置は B あるいは P を単独でドーピングする場合と比べて、それぞれ 0.5~0.1eV 程度深くなっている。互いにキャリアを補償するドーパントが共存することにより、キャリアの束縛がわずかに強くなった結果と考えられる。この結果、ドーピングされていない Si 量子ドットと比べて HOMO と LUMO の間隔が狭まり、光学的および電気的特性の変調が起こる。

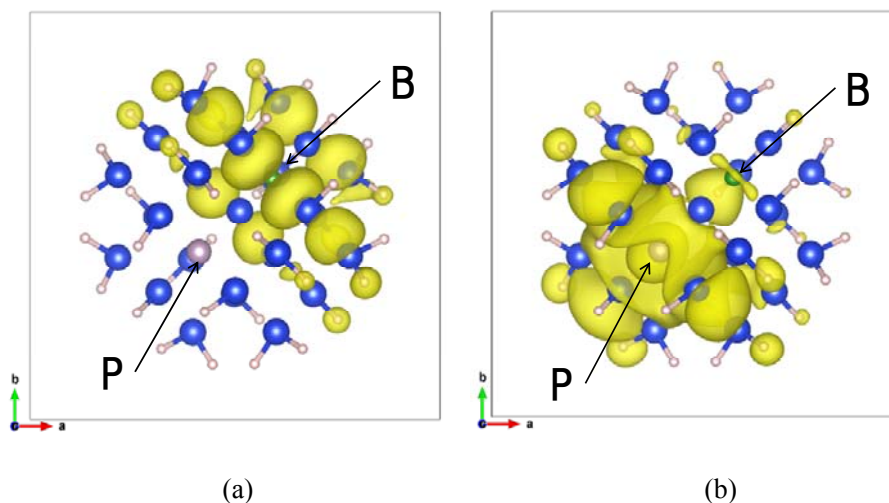


図 B と P を同時にドーピングした直径 1.1nm の水素終端 Si 量子ドットの (a) HOMO および (b) LUMO .