

## シリコン量子細線における弾道的フォノン熱輸送に与えるヒ素ドーピングの影響

## Effects of Arsenic Doping on Ballistic Phonon Thermal Transport in Silicon Nanowires

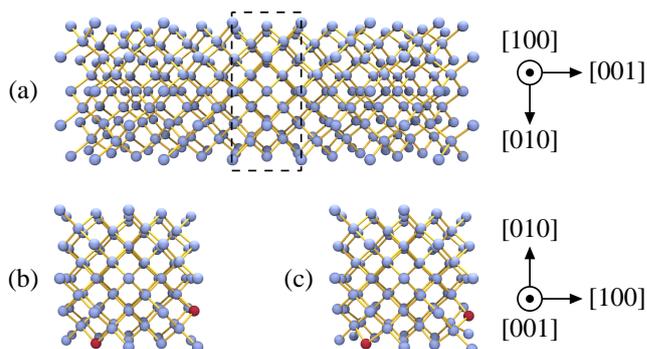
産総研<sup>1</sup>, 立命館大総研<sup>2</sup>, 立命館大理工<sup>3</sup>, JST, CREST<sup>4</sup> ○服部 淳一<sup>1,2,4</sup>, 宇野 重康<sup>3,4</sup>AIST<sup>1</sup>, Ritsumeikan Univ.<sup>2</sup>, JST, CREST<sup>3</sup> ○Junichi Hattori<sup>1,2,3,\*</sup> and Shigeyasu Uno<sup>2,3</sup>

\*E-mail: j.hattori@aist.go.jp

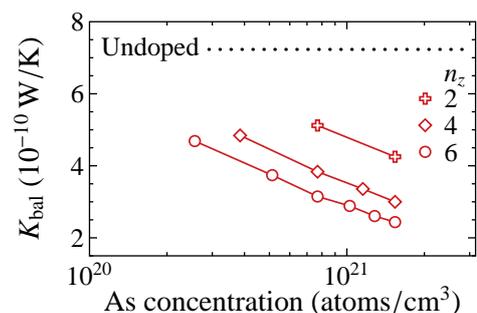
**背景** 次世代の極微細トランジスタ [1, 2] や高効率の熱電変換デバイス [3, 4] を実現する材料として、シリコン量子細線 (Si NW) が注目を集めている。これらのデバイスの研究開発においては、Si NW の熱輸送特性を考慮する必要がある。なぜなら、トランジスタでは、動作中に発生した熱がこもることで性能低下を引き起こされ [5]、一方の熱電変換デバイスでは、熱輸送特性が悪いほど変換効率が良くなるからである [3, 4]。以上のことから、Si NW における熱輸送現象の詳細な物理を明らかにすることは重要といえる。そこで本研究では、デバイスの製造工程において Si NW の電気的特性を変えるためにドーピングされる不純物原子に着目し、特にヒ素 (As) 原子について、フォノンによる熱輸送に与える影響を調べた。

**計算** まず、Fig. 1 に示すように、Si NW の単位胞内の Si 原子をいくつか選んで As 原子に置換したのち、作用する力の和が 0 となるように各原子を動かして構造を最適化した。なお、原子に作用する力は Stillinger-Weber 型の原子間相互作用ポテンシャル [6] で定まるとした。次に、格子動力学計算 [7] によって Si NW におけるフォノン分散関係を求めた。最後に、フォノンは一切の散乱を受けず、弾道的に伝導するという仮定の下で、得られた分散関係から熱コンダクタンス [8] を計算した。As 原子の位置や数を変えて一連の計算を繰り返し、熱コンダクタンスの変化を調べた。

**結果** Fig. 2 に、熱コンダクタンスと As 濃度の関係を示す。As ドーピングによって熱コンダクタンスは小さくなるのが分かる。この原因は、Si NW における質量および原子間力定数の秩序性が、導入された As 原子によって損なわれることにある。これらの秩序性低下は、As 原子を含まない Si NW では縮退しているようなフォノンモードの分裂を招き、分散曲線の平坦化を経てフォノン群速度の低下をもたらす。その結果、熱コンダクタンスも低下することになる。



**Fig. 1.** (a) Side view of the Si NWs considered in this study. The NWs are grown in the [001] direction and have a square cross section with a side length of about 1 nm. The part enclosed by the dashed line represents a primitive cell of undoped NWs. (b and c) End views of an As-doped Si NW before and after structural optimization. The As atoms are colored dark red.



**Fig. 2.** Ballistic thermal conductance in As-doped Si NWs at 300 K, plotted as a function of As concentration. Each plotted value is averaged over more than 16 NWs. In the calculation, a unit cell of doped NWs was set to be  $n_z$ -times as large in the [001] direction as a primitive cell of undoped NWs ( $n_z = 2, 4, 6$ ).

**参考文献** [1] N. Singh *et al.*: IEEE Electron Device Lett. **27** (2006) 383. [2] K. H. Yeo *et al.*: IEDM Tech. Dig., 2006, p. 539. [3] A. I. Boukai *et al.*: Nature **451** (2008) 168. [4] A. I. Hochbaum *et al.*: Nature **451** (2008) 163. [5] R. Wang *et al.*: IEEE Electron Device Lett. **30** (2009) 559. [6] Y. Lee and G. S. Hwang: Phys. Rev. B **85** (2012) 125204; Phys. Rev. B **86** (2012) 075202. [7] A. Paul *et al.*: J. Comput. Electron. **9** (2010) 160. [8] J. Hattori and S. Uno: Jpn. J. Appl. Phys. **52** (2013) 04CN04.