

B および P をドーピングした Si 量子ドットの電子状態 ～不純物準位のドーパント位置依存性～

Electronic properties of B- or P-doped Si quantum dots

～ Doping-site dependence of impurity levels ～

○金田 千穂子 (富士通研究所)

○Chioko Kaneta (FUJITSU LABORATORIES Ltd.)

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

【はじめに】Si 量子ドットは、資源として豊富な Si が主材料であり、サイズやドーパントの選択により電氣的あるいは光学的特性の制御が可能であることなどから、次世代電子デバイス、発光デバイス、太陽電池などの構成要素として注目されている。これらの応用上必要な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、量子ドットのサイズやドーパントの種類・位置に応じた電子状態の変化を知ることは重要であるが、そのような研究はまだ少ない。

【モデルおよび計算方法】直径 1.1nm 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内でのドーパントの位置に対してどのように変化するかを調べた。比較のため、量子ドットの直径が 2.4nm の場合についても計算を行った。計算には密度汎関数法を用い、スピン分極を考慮した。エネルギーギャップを定量的に議論するために、ハイブリッド汎関数法を用いた。計算プログラムは PHASE[1]を利用した。

【結果】以下では Si 量子ドットの内の不純物の種類と位置を X_n のように表記する。X は不純物の種類(B または P)、n はドットの中心 0 から第 n 近接位置にあることを示す。図 1 に示した直径 1.1nm の水素終端 Si 量子ドットの場合には、第 2、3 近接位置の不純物は水素 1 および 2 原子と結合している。Si 量子ドットの中心の Si を B または P で置換すると、これらはそれぞれノンドーピング Si 量子ドットの HOMO の高エネルギー側または LUMO の低エネルギー側に不純物準位を形成する。B、P の位置を中心位置 0 から第 3 近接位置まで変化させた場合の不純物準位の変化を図 2 に示す。図中の数値は異なるスピンごとに示された HOMO-LUMO ギャップの値 (単位は eV) で、HOMO と LUMO の間に書き込まれている。不純物がドットの中心 0 から遠ざかるにつれて不純物準位はギャップ中の深い位置へ大きく動いているのがわかる。P、B いずれの場合も、ドットの中心 0 と第 1 近接位置での安定性はほぼ等しい (差は 30meV 以下) が、不純物準位の変動は顕著であり、電子状態の制御には不純物サイトの制御が重要であることが示唆されている。講演では、直径 2.4nm の量子ドットに対する結果との比較から、ギャップ中準位に対応する波動関数の広がりや水素との結合との関係についても議論する。

[1] <https://azuma.nims.go.jp>

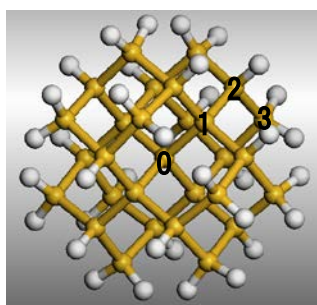


図 1 直径 1.1nm の水素終端量子ドット内の中心原子位置(0)と近接サイト(1-3)。Si、H はそれぞれ黄および白球で表示。

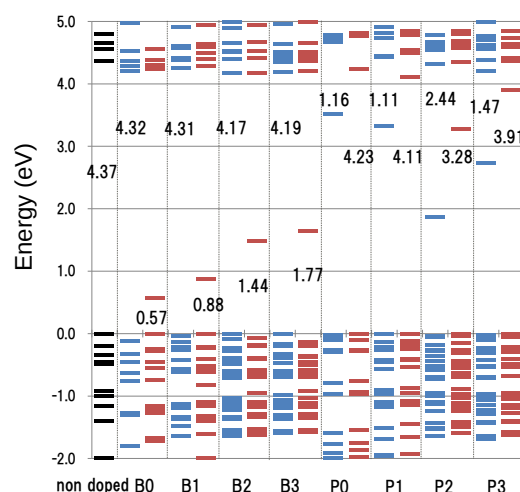


図 2 ノンドーピングおよび B または P をドーピングした直径 1.1nm の水素終端 Si 量子ドットの HOMO-LUMO ギャップ。up および down スピンの状態を青と赤で表示。ノンドーピングの場合はスピン分極を考慮していない。