

## Al, N を添加した Si の構造安定性と電子状態

## The electronic states and the configurations of Al, N doped Si

○屋山 巴<sup>1</sup>、知京 豊裕<sup>1</sup> (1. 物材機構)○Tomoe Yayama<sup>1</sup>, Toyohiro Chikyo<sup>1</sup> (1.National Institute for Materials Science.)

E-mail: YAYAMA.Tomoe@nims.go.jp

【緒言】近年Siを用いたトンネルFET のトンネル接合領域にAl, N をともに添加することにより、オン電流を従来の約10 倍に増大させるという新たなデバイス機構が提案された<sup>1)</sup>。Siは間接ギャップを有するが、不純物の添加により局在準位が生じ、運動量保存の条件が緩和されて電子-フォノン結合なしに電子遷移を生じる確率が高められるためであると考えられている。このような現象は「等電子トラップ」として主にGaP系LED などの輻射発光過程で報告されているが<sup>2)</sup>、FET のような電子伝導を伴う系での観測例はこれまでにない。電子伝導系における同理論を確立するためには、不純物をドーブしたSi とSi の間の界面の微視的な物性理解が待たれる状況である。本研究では、ゲート-チャンネル界面近傍における電子物性解明のため、不純物の原子配置と電子状態に関する計算を行った。

【計算方法】Si 中に添加された等量の Al, N 原子の安定な原子配置を明らかにするため、単位格子  $2 \times 2 \times 2$  のダイヤモンド構造 Si 64 原子バルクモデルのうち、Si2 原子をそれぞれ Al, N 原子に置き換えた  $\text{Si}_{62}\text{Al}_1\text{N}_1$  構造を用いて全エネルギー計算を行った。構造は Al, N 原子を第 1-7 近接位置に配置した 7 通りのモデルを用いた。これは、等価でないすべての配置に相当する。本研究では密度汎関数法パッケージソフトウェア VASP を用いた。一般化勾配近似の下で Perdew-Burke-Ernzerhof による交換相関汎関数を用い、平面波基底のカットオフエネルギーは 400eV とした。

【結果と考察】図1にAl, N原子を7通りの配置について計算した全エネルギーを示す。横軸はAl, N原子間距離である。AlおよびN原子が第一近接に存在する場合は、他の配置に比べて約1eV以上エネルギー的に安定であることがわかる。このことから、Si内に分布するAl, N原子は最近接位置に対になって存在している可能性が高い。図2にAl, N原子を最近接位置に配置した構造モデルと電荷分布を示す。Al, N原子から離れた位置では、Siは共有結合を保っているが、不純物原子近傍では電気陰性度の大きいN原子に電子がひきつけられていることがわかる。このことから、Nが局在準位を形成すると考えられる。発表ではさらに電子状態の計算結果を示しながら、不純物準位の役割についても議論を行う。

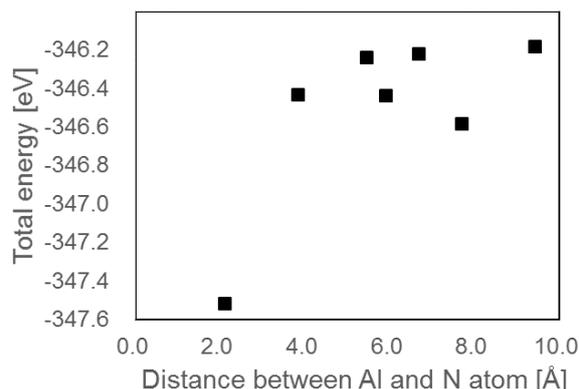


図1: 各配置における Al, N 原子間距離と全エネルギー。

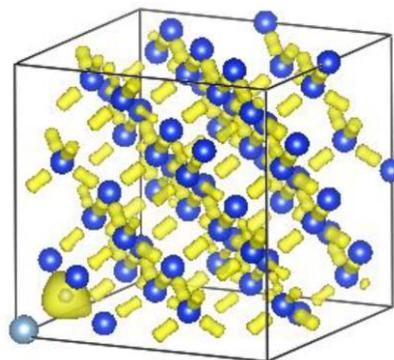


図2:  $\text{Si}_{32}\text{AlN}$  第一近接置換モデルと電荷分布。(Al: 水色, N: 黄, Si: 青)

1) K. Fukuda et al, J. Appl. Phys. 144 (2013)144512; T. Mori et al., 8.2, VLSI Symp. 2014 など。

2) D. G. Thomas and J. J. Hopfield, Phys. Rev. 150 (1966) 680; P.J. Dean, J. Lumin. 7 (1973) 51-78; R. A. Modavis and D. G. Hall, J. Appl. Phys. 67 (1990) 545.