

第一原理計算を用いた外部電場による Si ナノ構造上の不純物への影響

First-principle study of the effect of external electric field on dopants in Si nano-structures

静大電研¹, 北陸先端大², [○]山口 謙祐¹, ムルガナタン・マノハラン², 水田 博²,
田部 道晴¹, モラル・ダニエル¹

Shizuoka Univ.¹, JAIST², [○]Kensuke Yamaguchi¹, Manoharan Muruganathan², Hiroshi Mizuta²,
Michiharu Tabe¹, Daniel Moraru¹

E-mail: yamaguchi.kensuke.15@shizuoka.ac.jp

I. 緒言

近年、微細化されたシリコン中において、高濃度ドーピングされた Si トンネルダイオードが特異的な振る舞いをする事が報告されている[1]。過去の研究で第一原理計算を用いて、ナノスケール中の Si ナノワイヤ中にリンとホウ素を添加し、このドーパント間の最適な距離において、トンネル電流が高くなることを報告した[2]。本報告では、Si ナノプレート上にリンとホウ素を添加し、ドーパント間の距離を変化させ、外部電場を印加した時の局所状態密度(LDOS: Local Density of States)について検討をしたので報告する。

II. 方法

第一原理計算ソフト OpenMX [3]を用いて、Fig. 1.に示すような構造に作製し、構造最適化を行った。その後、外部電場をリンからホウ素原子の方向へ印加した状態で、DOS の計算を行い、評価を行った。

III. 結果

Fig. 2.に外部電場を印可していない場合(a)と、印加している場合(b)を示した。電場を大きくすることによって、ドナー準位とアクセプター準位が概ね一致し、禁制帯中に状態密度が現れた。この結果は、ドーパント準位を介した共鳴トンネルの実現を示唆するものだと考えられる。これに関して、さらなる検討が必要であり、Si ナノプレート内部に及ぼす電場の影響や、不純物によるエネルギー準位への影響に関して解析を行い、講演にお

いて詳しく発表する予定である。

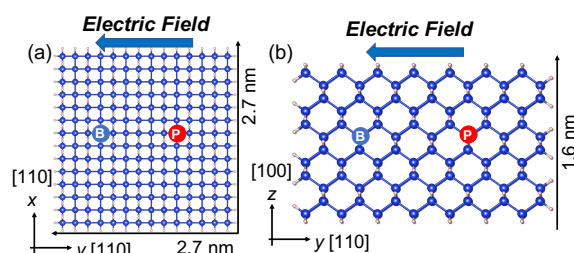


Fig. 1. Co-doped silicon nanoplate structure.

(a) Top view. (b) Side view.

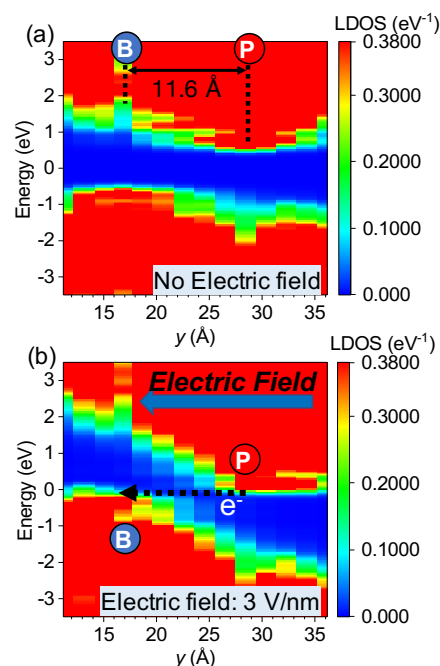


Fig. 2. (a) LDOS at zero-electric field.

(b) LDOS at an electric field of 3 V/nm.

[1] M. Tabe *et al.*, Appl. Phys. Lett. **108**, 093502 (2016).

[2] M. Manoharan *et al.*, JSAP Spring Meeting 2017.

[3] See <http://www.openmx-square.org/> for more detail of the computational software used in this research.