Si(111) p 型空間電荷層のバンド湾曲形状の価電子量子化による平坦化

Flattening of the band profile of Si(111)　p-type space charge layer by the standing wave formation of valence electrons

奈良先端大[1], マレーシアイスラム国際大[2] ○武田さくら[1], Nur Idayu Ayob[2], 大門寛[1], 稲垣剛[1]

NAIST[1], IIUM[2], ○Sakura N. Takeda[1], Nur Idayu Ayob[2], Hiroshi Daimon[1], Takeshi Inagaki[1]

E-mail: sakura@ms.naist.jp

ナノ領域で生じるバンド湾曲は，電子の多体効果や，狭い領域でのドーパント濃度の変調など，様々な効果の影響を顕著にうけ，教科書的な単純なバンド湾曲曲線の形状よりも複雑になると考えられる．特に界面直下のバンド湾曲曲線は FET のサブスレッショルド電圧に大きく影響を与えるため，より精密なデバイス動作予測をおこなうためにはその正確な形状を知ることが重要である．バンド湾曲曲線を第一原理計算で求めることは困難なため，角度分解硬 X 線光電子分光（AR-HAXPES）実験にてバンド湾曲の曲線形状が調べられている[1, 2]. 一方，我々は，チャネル中で量子化されたキャリアのエネルギー準位を実測し，そのエネルギー準位を持つバンド湾曲曲線を決定するという，バンド湾曲曲線の形状を決定する新しい手法の開発を進めている．本講演では，異常なエネルギー間隔を持つサブバンド準位が観測された極狭 Si(111) 反転層 [3]を対象に，様々なバンド湾曲曲線中のサブバンド準位を数値計算で求め，実測された Si(111)p 型空間電荷層中のサブバンド準位を再現するバンド湾曲曲線を計算で探索的に決定したので報告する[4]. 得られたバンド湾曲曲線 V(z)は表面直下で平坦な形状となった(図 1 (a)). 得られた V(z)にポアソン方程式 $\varepsilon\frac{d^2V(z)}{dz^2z}=\rho(z)$ を適用し局所電荷密度 ρ (z)を求めた結果，表面直下に負の電荷が分布し，それがバンド湾曲を平坦にしていることを見出した．この負電荷は，図 1 (b)に示すように量子化によって価電子が不均一分布するため、原子核と電子を合わせた総電荷が 0 でなくなったため生じたと考えらえる．このような表面直下の負電荷分布は，ナノ厚の p 型反転層では普遍的に生じるため，今後のデバイス動作予測に取り入れる必要がある.

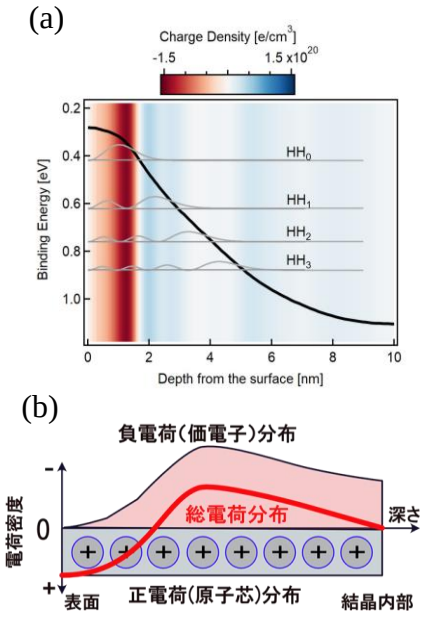

Fig. 1 (a) 本研究で得られた Si(111)極狭空間電荷層のバンド湾曲曲線 $V(z)$ と量子準位，及び V(z)を二回微分して導出した局所電荷密度 ρ (z)(色表示). (b)バンド湾曲平坦化の原因となる表面直下の負電荷分布形成機構.

[1] Z. H. Lim *et al.*, Phys. Rev. Lett. **123**, 026805 (2019).[2] P. V. Sushko *et al.*, Sci. Rep. **10**, 13028 (2020). [3] N. I. Ayob *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **54**, (2015).[4] N. I. Ayob, *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **60**, 064004 (2021).

© 2023年 応用物理学会