

Title	単一および共ドープしたシリコンナノ構造の電子・輸送特性の第一原理解析
Author(s)	Le, The Anh
Citation	
Issue Date	2014-12
Type	Thesis or Dissertation
Text version	ETD
URL	http://hdl.handle.net/10119/12621
Rights	
Description	Supervisor:水田 博, マテリアルサイエンス研究科, 博士

氏名	LE THE ANH		
学位の種類	博士(マテリアルサイエンス)		
学位記番号	博材第 364 号		
学位授与年月日	平成 26 年 12 月 24 日		
論文題目	Ab-initio study of electronic and transport properties of single-and co-doped silicon nanostructures (単一および共ドーピングしたシリコンナノ構造の電子・輸送特性の第一原理解析)		
論文審査委員	主査	水田 博	北陸先端科学技術大学院大学 教授
		村田 英幸	同 教授
		水谷 五郎	同 教授
		小矢野 幹夫	同 准教授
		田部 道晴	静岡大学 教授

論文の内容の要旨

Keywords: binding energy, density functional theory, non-equilibrium Green's function, single-doped silicon nanostructures, co-doped silicon nanostructures.

Recently, single dopant electronics has opened a new group of extremely-small and low power devices, including single-electron FETs. The basic operations of single dopant devices are based on single-electron tunneling mediated by a single dopant. The binding energy of donor electrons should be much higher than the thermal energy to ensure single dopant devices operate at room temperature; therefore, it is important to accurately estimate the binding energy of donor electrons not only for single dopant devices in particular, but also for nanometer-scale devices in general. In bulk silicon, the donor ground state is shallow and independent from the bottom of the conduction band of Si crystal. In nano silicon, which has dimensions smaller than the Bohr radius of donor electrons in bulk, the interaction between the donor related states and the host Si conduction states becomes significant due to the strong nanoscale confinement. The binding energy in nano Si therefore should be studied from a different point of view to the binding energy in bulk Si.

By performing DFT calculations, I have determined the binding energy of electrons bound to a single phosphorus donor atom in silicon nanorods. The projected density of states (PDOS) and 3D wavefunctions (3DWFs) analysis can clarify the gradually decreasing contribution of the phosphorus electron states from the donor ground states to the higher energy donor excited states due to the hybridization of the donor electron states and silicon electron states. Therefore, I can identify the energy of the first conductive state. The binding energy of the donor electrons in the single P-doped Si nanorods, which have an average radius smaller than 1.4 nm (which is smaller than $a_0 = 3\text{nm}$, the Bohr radius for

phosphorus electrons in bulk Si) is calculated as the difference between the first conductive state and the donor ground state. I have found that the binding energy is still around 1.5 eV. As the size decreases below 1.4 nm, the first conductive state is capped near the top of the atomistic effective potential at the phosphorus donor site, whereas above the potential top the electron wavefunctions are more delocalized and can attribute to conduction. This causes the binding energy in sub-1.4 nm Si nanorods to be weakly dependent on the sizes. This fact signifies the good tolerance level of the binding energy, which governs the operating temperature of single dopant-based transistors in practice. The transmission spectra calculated by the non-equilibrium Green's function, which reflects into the transport properties of electrons in silicon nanorod devices, show consistent results with the PDOS-3DWFs method, proving the validity of the new method.

Following this, I have applied the PDOS-3DWFs method to investigate the dependence of binding energy on the position of P atoms in single P-doped cross-shaped Si nanostructures. When the P atom is located at the wing of the cross-shaped nano structure, it is more difficult for the wavefunction to spread entirely within the structure, especially along the horizontal transport direction; this results in higher binding energy for the P atom at the wing of the cross-shaped Si nanostructure. The experimental study of stub-channel FETs, which is similar to cross-shaped model established by the Tabe group from Shizuoka University, shows that electron tunneling has higher barrier energy than conventional straight shape FETs. The theoretical results of the cross-shaped Si nanostructures are consistent with the experimental results for the stub-channel FETs.

Finally, the interaction between donor D^0 and acceptor A^0 ground states have been studied theoretically in phosphorus-boron co-doped silicon nanorods; the different effective atomistic potential at the P site and B site decreases from about 1.5 eV to around 0.5 eV when the two dopants move closer towards each other from 2.17 nm to 0.23 nm. This suggests that the built-in atomistic potential in co-doped silicon nanorods strongly depends on the P-B separation. Moreover, the D^0 wavefunction is destructive at the boron site, whereas the A^0 wavefunction is destructive at the phosphorus site. When two dopants come closer, the overlapping of the B and P original atomic orbitals increases. As a result, the values of wavefunctions of A^0 and D^0 at the boron and phosphorus sites decrease. The wavefunctions become less localized and shallower, which is consistent with the transmission analysis that transmissions associated with dopant induced states change in nature from discrete to continuous.

論文審査の結果の要旨

現在のシリコンテクノロジーは、トランジスタの発明以来ドーパント不純物原子を利用して発展してきた。しかし、素子の微細化に伴い、チャンネル中のドーパント原子の個数が減少して配置による特性ばらつき（ドーパント揺らぎ）が深刻な問題となっている。このような状況のもと、

シリコンナノ構造中にドーパント原子1個～数個を埋め込んでトンネル型電子輸送を制御し、全く新しい極微細・低消費電力デバイスを創出する【シングルドーパントエレクトロニクス】の原理探索が進められている。本研究では、その基本構造となる単一ドーパント原子、および単一ドナー・アクセプター原子ペア（コドーピング）を有するシリコンナノ構造中での電子状態とそれを介したキャリアトンネル特性を、大規模・第一原理計算で解明し、シングルドーパントトランジスタおよび原子スケールPN接合の動作原理と設計指針を見出すことを目的とした。

具体的には、シリコン中の電子ボーア半径と同程度あるいは更に微細化したシリコンナノロッドシリコンナノチャンネル構造内に単一リンドナー原子を埋め込んだ素子構造に対して、密度汎関数法・第一原理計算による電子状態計算と、非平衡グリーン関数法電子輸送計算を行い、ドナー原子とその周辺のシリコン原子の軌道混成を精密に取り入れた波動関数の3次元解析と、射影状態密度（PDOS）解析を組み合わせてドナー電子のBinding Energyを計算する新たな手法を考案した。これにより、（1）バルク素子に対して用いられて来た従来のBinding Energy計算手法が極微構造に対しては成り立たないこと、（2）チャンネル寸法ボーア半径の領域ではBinding Energyが寸法によらずほぼ一定となること、（3）チャンネル構造をスタブ型にした素子構造で実験的に観測されている動作温度の高温化が、単一リンドナー原子のチャンネル内位置に依存してBinding Energyが変化することに起因すること、を初めて見出した。さらに、ナノロッドチャンネル中に単一リンドナー原子とボロンアクセプター原子を含むコドーピング素子構造では、（1）ドナー・アクセプター原子間距離が減少するにつれて、ドナー電子の基底状態とアクセプター正孔の基底状態間に波動関数のDestructive Interactionが生じ、それぞれの深い基底準位間のエネルギー間隔が増大すること、（2）それによりアトミック・ビルトイン電圧が大きく減少すること、を明らかにした。

以上、本論文は、これまで実験的に極めて不十分であったシングルドーパントデバイスの動作原理と今後の設計指針を初めて解明した独創性の高い研究であり、学術上・応用上両方の観点から極めて価値の高いものである。よって博士（マテリアルサイエンス）の学位論文として十分価値あるものと認めた。