

令和 5 年 5 月 24 日現在

機関番号：12501

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2020～2022

課題番号：20K03815

研究課題名(和文) 金属/半導体界面におけるギャップ状態の消滅機構・電場下での変形の理論

研究課題名(英文) Theory of gap states at metal/semiconductor interfaces; annihilation mechanism and deformation in electric fields

研究代表者

中山 隆史 (NAKAYAMA, Takashi)

千葉大学・大学院理学研究院・教授

研究者番号：70189075

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、第一原理計算に基づき、金属/半導体界面におけるギャップ状態の消滅機構や電場下でのギャップ状態変形の仕組みを調べた。その結果、(1)Bi、Pb等の単純金属では、原子の原子半径が大きく電子密度が低いので、金属は半導体層と有効な原子結合を作らず、半導体側のギャップ状態は消滅すること、(2)電場下では半導体のバンドギャップは有効的に小さくなるため、ギャップ状態の侵入長は伸びること、(3)半導体のpn接合に欠陥準位があると、電場下ではギャップ状態とエネルギー共鳴して、ギャップ状態の侵入長を伸ばしトンネル電流を数桁増大させること等の物理描像を解明した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

金属/半導体界面においては、金属の電子が「ギャップ状態」として半導体のバンドギャップ内に侵入し、界面に多量の欠陥を発生させたり界面を介しての電子の移動障壁を大きく変化させる。しかし、このギャップ状態を消滅させる仕組みや、電場下でギャップ状態がどのように変質するかは明らかでなかった。本研究では、量子力学に基づく数値計算を行い、これら疑問点を解明した。特に、電場下においてギャップ状態が欠陥と結びつくことと侵入長は大きく伸び、界面を介した電流を数桁増大させることを解明したが、この結果は学術的に大きな意義を持つだけでなく、将来のデバイス応用にも多くの知見を与えると期待される。

研究成果の概要(英文)：Mechanisms of annihilation and deformation of band-gap states have been studied around metal/semiconductor interfaces in electric fields based on the first-principles calculations. This project has clarified the following physical pictures; (1) as for simple metals such as Bi and Pb, since their atomic radii are large and their electron densities are low, the metal atoms do not form effective atomic bonds with the semiconductor layers, and thus the metal-induced gap states (MIGS) on the semiconductor side disappear, (2) since the bandgap of the semiconductor is effectively reduced under an electric field, the penetration depth of gap states is extended, and (3) when there are some defect levels in the semiconductor pn junction in an electric field, the energy resonance occurs between gap states and conduction/valence-band states, which enlarges the penetration depth of gap states and increases the tunnel current by several orders of magnitude.

研究分野：物性理論、表面界面物理、半導体物理、ナノサイエンス

キーワード：金属/半導体界面、ギャップ状態、第一原理計算、ショットキーバリア、pn接合、トンネル電流、電場環境下、エネルギー共鳴

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

金属/半導体界面は、伝導光学実験や電子デバイスの心臓とも言える基本構造である。界面の半導体側では、原子間結合が切れ並進対称性が破れるため、界面に局在しバンドギャップ内にエネルギーを持つ「ギャップ状態」が現れる。この状態は、界面の基本物理量であるショットキーバリア(半導体の価電子・伝導帯端に対する金属の Fermi Level(FL)の相対エネルギー位置)を支配するだけでなく、界面に多量な欠陥を発生させることが、我々の以前の研究から分かっている。界面の性質を自在に設計するためには、このギャップ状態の生成・消滅・変形を自在に制御することが重要な課題となるが、その仕組みは良く分かっていなかった。

本研究では、鍵となる最近の2つの実験研究に注目した。1つ目は、「ギャップ状態の消滅」に関する現象である。バンドギャップの小さいGe半導体は、金属との界面で高密度のギャップ状態を持つために、FLが金属種に依らず一定値を持つ (FL ピニングという) という顕著な性質を示す代表的な系である。最近、Bi/Ge等のいくつかの界面でこのピニングが破れるという異常が発見されたが、その原因は全く不明であった。2つ目は、「ギャップ状態の変形」に関する現象である。最近、Si半導体のpn接合界面に不純物をドーピングすると、価電子帯から伝導帯へのトンネル電流が3桁ほど増大する現象が発見され、新たなトンネルデバイスとして期待された。我々は、pn界面に発生するギャップ状態が電場下では変質し電流の増大を引き起こすを予想していたが、未だその起源は明らかでなかった。ギャップ状態のこれら消滅・変形を解明し新しい界面物理を構築することは、重要な学術的課題の1つであった。

2. 研究の目的

上記した2つの発見に対応して、本研究の第1目的は、様々な金属/Ge界面を題材に、ギャップ状態が消滅しピニングが破れるメカニズムを第一原理計算を用いて系統的に解明すること、第2目的は、第一原理計算と理論解析を用いて、電場下のギャップ状態の変形を解明し、実験で観測されているトンネル電流増大のメカニズムを解明することである。特に前者においては、最も簡易な単純金属を対象として、界面構造とショットキーバリアの関係を検討する。一方、後者においては、様々な半導体種や界面構造を考慮し、一般的な性質を議論する。これらの検討を通して、ギャップ状態の存在やその形態に関する物理描像を構築する。

3. 研究の方法

単純金属/Ge界面のショットキーバリアの計算には、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を用いた。図1(a)のような金属/Ge(001)界面の薄膜(2x2、3x3のrepeated slab)を用意し、金属原子をGe表面に徐々に供給して安定な構造を決めた。その構造の下で、Geの価電子帯下端を基準にしてショットキーバリアを計算した。代表的な金属として、Al, Au, Pt, Y, In, Bi, Pbを対象とした。pn接合界面における電流の計算には、系の大きさが大きくなるため、第一原理計算から求めたパラメータを用いた強結合モデルを用い、波束の時間発展及び非平衡Green計算を開発して用いた。図1(b)のように電場をかけたpn接合界面を考慮し、この界面に様々な不純物や構造を作成した。pn接合を作る半導体としては間接ギャップのSi, Ge、直接ギャップのInP, GaAs等を、不純物としてはN原子を、構造としてはSiGe量子井戸を対象とした。

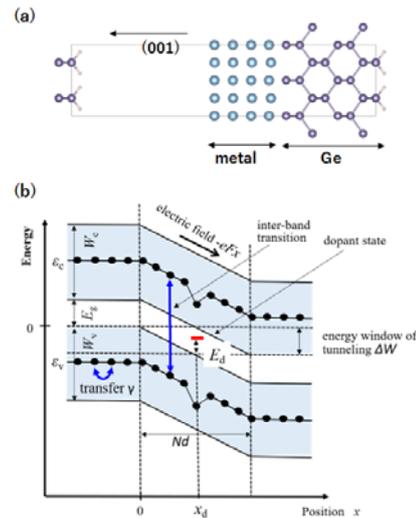


図1. (a)ショットキーバリア計算に用いた金属/Ge(001)界面のモデル。(b)トンネル電流計算に用いた強結合のpn界面モデルの模式図。

4. 研究成果

(1)単純金属/Ge界面のショットキーバリアと構造:

図2(a)に、様々な単純金属/Ge界面での正孔に対するショットキーバリアの計算値と実験値を示す。計算においては、ここでは薄膜を用いているために負の値はほぼゼロのバリアの値を考

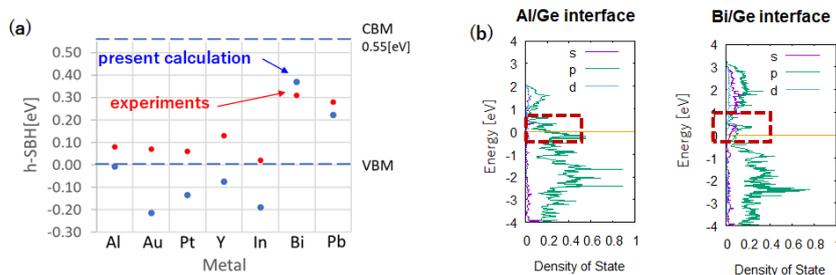


図2. (a)様々な金属/Ge界面での正孔のショットキーバリアの計算値(青)と実験値(赤)。(b)Al/Ge及びBi/Ge界面のGe層での状態密度。四角がGeのバンドギャップ領域。

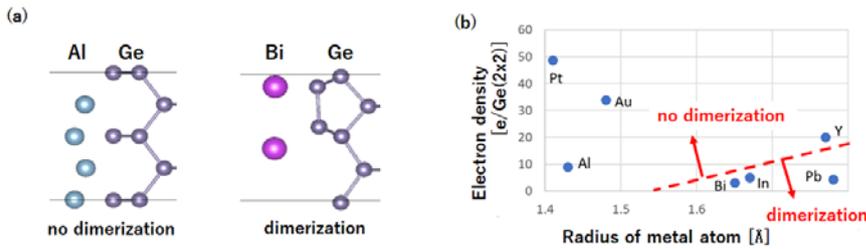


図3. (a)Al/Ge および Bi/Ge 界面の構造。(b) 金属界面原子のダイマー化と金属層面密度・金属原子半径との関係。

よい。多くの金属では計算したバリアは 0.1eV 以下となり、金属の FL は Ge の価電子帯上端付近にピンングしていることが分かる。一方、Bi, Pb では 0.2eV となりピンングが破れている。この結果は実験と整合する。ピンングの起源を明らかにするために、界面の Ge 層の状態密度を Al, Bi 界面に対して図 2(b)に示す。Bi 界面では、Ge のバンドギャップ内に現れるギャップ状態が顕著に減少していることが見え、これがピンング破れを引き起こしていることが分かる。

ギャップ状態が減少する原因はその界面構造にある。図 3(a)に Al, Bi 界面での原子配置を示す。Al 界面では、1 層目の Al 原子は Ge の 4 配位に繋がるように位置している。一方 Bi 界面では、1 層目の Ge 原子は Ge(001)表面のように Ge 原子通してダイマーを作り、Bi 原子との結合が弱くなっていることが分かる。この構造の差異の原因は、金属原子の原子半径と金属層の電子面密度にある。図 3(b)に構造とこれら量との関係を示す。原子半径が大きい Bi や Pb においては、Ge の 4 配位位置に原子が来ることができず(幾何効果)、また半径が大きいために電子密度も十分でないために Ge と結合を十分に作れない(面密度効果)。そのために、1 層目の Ge 原子は表面と同様なダイマー構造を保ったまま界面を形成する。こうして、Bi および Pb においては、金属原子と Ge 原子の結合が十分でないために、金属が誘起するギャップ状態が形成されにくくなる。実際、Bi, Pb においても仮想的にダイマーを壊してバリアを計算すると、ピンングが起きることを確認できる。

我々のこれまでの化合物金属/Ge 界面におけるショットキーバリアの研究とも併せて考えると、ギャップ状態の消滅は、半導体原子の 4 配位が(1)ダイマーのように半導体性を保つように自己完結型で終端される、または(2)N や O のようにイオン性の強い結合で終端される場合に起こることが明らかになった。

(2)共鳴した不純物準位によるトンネル電流の増大： 電場が加わった pn 接合界面は、p 層の価電子帯、n 層の伝導帯を金属層と考え、pn 接合部を半導体と考えると、まさに金属/半導体界面と等価な界面ととらえることができる。図 4(a)に、Si-pn 接合に不純物をドーブした時としない時のトンネル電流を印加した電圧の関数として示す。ドーブにより電流は $10^4 \sim 10^6$ 倍増大しているが、この結果は実験と整合する。増大の起源を明らかにするために、電子の透過スペクトルを図 4(b)に、pn 接合界面近傍での局所状態密度(LDOS)を図 4(c)に示す。ドーブにより約 -0.65eV 付近に大きいピークが現れていることが分かる。これは、 $x=8\text{nm}$ 近くにドーブした Al+N 複合不純物が伝導帯下端につくる不純物準位に対応する。この不純物準位は、図 4(c)を見てわかるように、右側の n-Si 層の伝導帯とつながっている。つまり図 4(d)に示すように、n-Si 層の伝導帯起源のギャップ状態が同じエネルギーを持つ不純物準位とエネルギー的に共鳴してつながった状態と考えられる。このつながりにより、p-Si 層から n-Si 層へのトンネル距離は短くなり、トンネル電流が数桁増大したことが分かる。

注目すべきは、図 4(b)に見るように、このつながりは -0.65eV の共鳴準位位置だけでなく、その周辺のエネルギーにおける透過率も増大させている。つまり、pn 接合の電場下においては、ギャップ状態はギャップ内への侵入を深くする。これは、見方を変えると、電場により有効的なバンドギャップの値が小さくなり、ギャップ状態のギャップ内への侵入が深くなったということができる。この性質を使って以下の(4)では人工的な量子井戸によりトンネル電流を増大させる理論的予言と実験的検証を説明する。

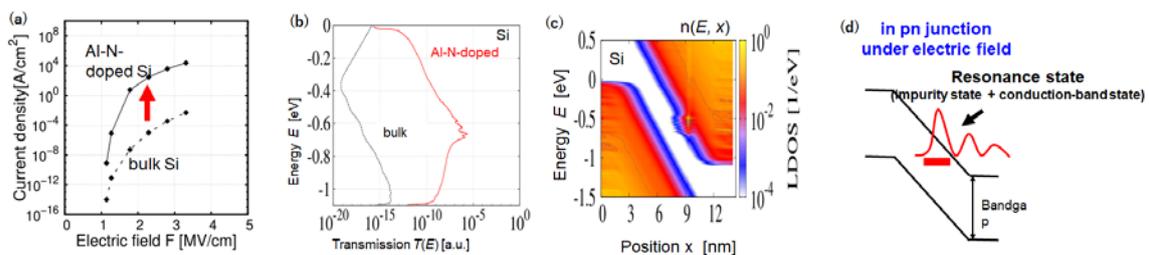


図4. Al+N をドーブした Si-pn 接合界面での、(a)計算されたトンネル電流、(b)透過スペクトル、(c)界面近傍の局所状態密度、(d)トンネル電流増大の仕組みの模式図。

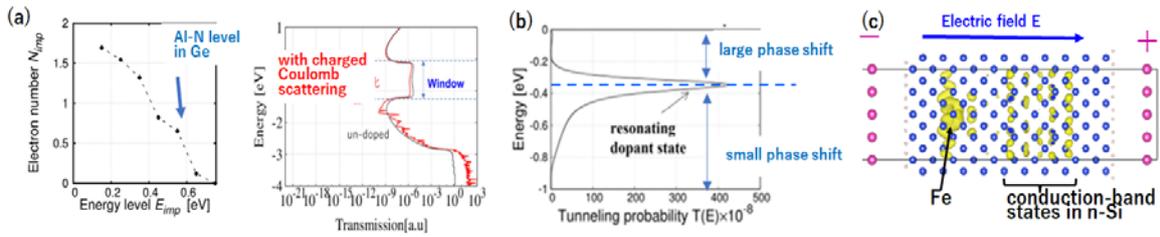


図4. (a)Ge-pn 接合のトンネル電流下における不純物準位の帯電数の不純物エネルギー位置依存性 (左) と帯電に伴うクーロン散乱を考えた時の透過率スペクトルの例 (右)、(b)Si-pn 接合内の約-0.35eVにある不純物準位に共鳴した電子の透過率スペクトルにおける Fano 効果 (線形スケール)、(c)Si-pn 接合中の Fe 不純物の d 軌道と n-Si 層内の伝導帯状態との電場下における共鳴の様子。

次に、不純物準位と伝導帯起源のギャップ状態の電場下での共鳴の以下の3つの特性(i)~(iii)を考える: (i)電場がない時に不純物準位が電子非占有であっても、電場がかかり電流が流れるとその準位は電子占有に変わりうる。図4(a)左はトンネル電流が流れている時の不純物準位の帯電数を、バンドギャップ内の不純物準位のエネルギー位置の関数として求めたものである。電場下では帯電が起こっていることが分かる。この帯電によって電子キャリアはクーロン散乱を受けるようになる。その散乱を考慮した場合の電子の透過率スペクトルを図4(a)右に示す。電子の透過するエネルギーウィンドウ内では、クーロン散乱は透過率を数倍減少させることが分かる。しかしその大きさは、共鳴による数桁の増大と比べると非常に小さい。

(ii)不純物準位は離散的であり、伝導帯は連続的なので、それらがエネルギー共鳴すると Fano 効果が起こる。図4(b)は-0.35eV を中心に共鳴が起こっている場合の電子の透過率スペクトルである。-0.35eV の上下では共鳴時の位相差が異なるため透過率は非対称に広がっていることが分かる。この結果は、電流が増大する印加電圧の上下で電流の増加率が変化することを予想する。印加電圧の電場が Fano 効果を引き起こすという現象は、本研究で初めて発見されたものであり、今後、この観点から基礎研究が進むことも期待したい。

最後に、(iii)2つの電子状態が共鳴する条件を、電場により系の対称性がx方向に敗れている場合のn-Si層の伝導帯の連続的なギャップ状態に対して考える。不純物準位がs軌道からなる場合、x, y, z方向に偶関数なので、px軌道からなるXx点近くの連続状態と強く共鳴する。不純物準位がp軌道の場合、いずれかの方向だけに必ず奇パリティとなってしまうため、Xx, Xy, Xz周りの連続状態とは共鳴しにくい。Si中のAl-N不純物が共鳴したのは、不純物準位が主にNの3s軌道からできていたためである。不純物準位がd軌道の場合(図4(c)参照)、結晶場によって5つのd軌道はエネルギー的にT2とE状態に分かれているが、E(x2-y2, 3z2-r2)状態はXx点のpx軌道、T2(xy, yz, zx)状態は、xy軌道はXy点のpy軌道とzxはXz点のpz軌道と共鳴するが、yz軌道はy, z方向のパリティのために共鳴できない。

(3)共鳴状態の半導体種依存性: pn接合を作る半導体種が変わったら伝導帯起源のギャップ状態と不純物準位との共鳴はどのように変化するだろうか?そこで、間接ギャップ半導体(Si, Ge, GaP)と直接ギャップ半導体(GaAs, InP)の場合を比較した。不純物としては伝導帯下端近辺に不純物準位を作るAl-NまたはN原子を考えた。図5(a)に計算したトンネル電流を示す。間接ギャップ半導体の場合、上記したSiと同様に、不純物準位はギャップ状態と共鳴して電流を数桁増大させた。一方、直接ギャップ半導体ではトンネル電流値にはほとんど変化はなかった。

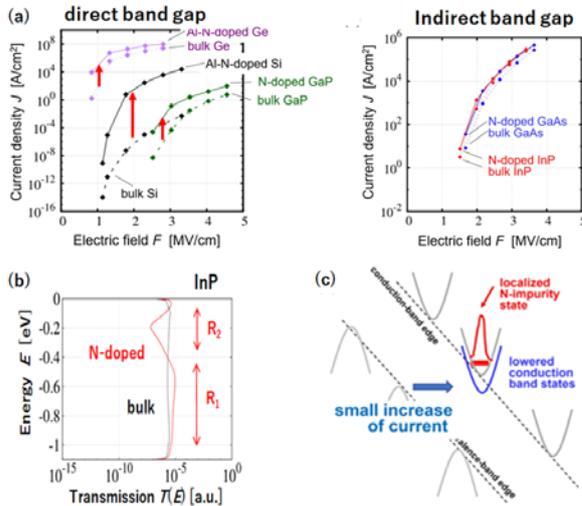


図5. (a)N系不純物をドーピングした直接及び間接ギャップ半導体pn接合におけるトンネル電流、(b)直接ギャップInPのpn接合における電子の透過率スペクトル、(c)N原子をドーピングした直接ギャップ半導体のpn接合におけるトンネル電流の模式図。

変化の小さかった原因を明らかにするために、図5(b)にInPの場合の電子の透過率スペクトルを示す。N原子がドーピングされると(赤線)、透過率は不純物準位のエネルギーの上下で減少・増加していることが分かる。この変化は、直接ギャップ半導体では、伝導帯のΓ点状態のエネルギーが低いために、図5(c)のように、不純物準位が伝導帯内に埋没していることで起こる。不純物準位よりエネルギーの低い領域では、

変化の小さかった原因を明らかにするために、図5(b)にInPの場合の電子の透過率スペクトルを示す。N原子がドーピングされると(赤線)、透過率は不純物準位のエネルギーの上下で減少・増加していることが分かる。この変化は、直接ギャップ半導体では、伝導帯のΓ点状態のエネルギーが低いために、図5(c)のように、不純物準位が伝導帯内に埋没していることで起こる。不純物準位よりエネルギーの低い領域では、

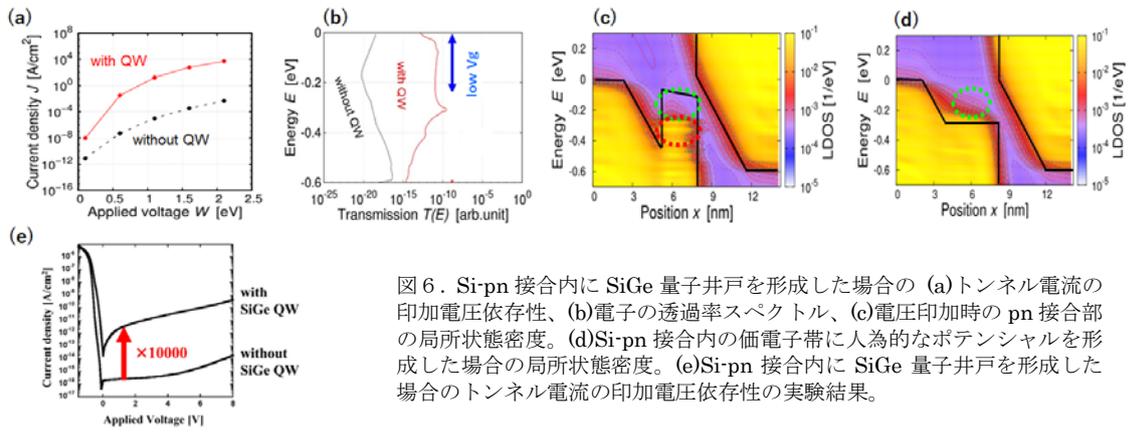


図 6. Si-pn 接合内に SiGe 量子井戸を形成した場合の (a)トンネル電流の印加電圧依存性、(b)電子の透過率スペクトル、(c)電圧印加時の pn 接合部の局所状態密度。(d)Si-pn 接合内の価電子帯に人為的なポテンシャルを形成した場合の局所状態密度。(e)Si-pn 接合内に SiGe 量子井戸を形成した場合のトンネル電流の印加電圧依存性の実験結果。

伝導帯は不純物準位に押されてエネルギーを下げ、バンドギャップが小さくなる。そのためにトンネル長は短くなり透過率は増加する。一方、不純物準位を含むエネルギーの高い領域では、トンネル長が長い透率は小さくなる。このように、電場下において不純物準位が伝導帯のどのエネルギー域と共鳴するかによりトンネル電流は増減し、特に直接ギャップ半導体では変化が小さくなることが分かった。

(4)ギャップ状態制御によるトンネル電流の増大： 上記した結果から、バンドギャップ内に適切な不純物準位を形成すると、電場下においては伝導帯や価電子帯のギャップ状態が不純物準位とエネルギー共鳴して、あたかもギャップ状態の侵入長を伸ばし、その結果トンネル電流を数桁増大させることが明らかになった。不純物の位置を制御することは難しいが、pn 接合内に位置を制御して量子井戸を形成することはできるので、この量子井戸内の準位を使えば、不純物準位の場合と同様の仕組みで、人工的にトンネル電流を増大できることが期待される。そこで、Si-pn 接合内に人工的に SiGe の量子井戸を作り、そのトンネル電流特性を調べた。

図 6(a)に計算したトンネル電流を印加電圧の関数として示す。量子井戸により、4-6 桁の増大が見える。その原因を明らかにするために図 6(b)に電子の透過率スペクトルを、図 6(c)に pn 接合部の局所状態密度を示す。図 6(b)の-0.3eV 近くのピークは、図 6(c)の赤点線で囲んだ領域に対応し、量子井戸内の重い正孔の量子化準位が p-Si 層の価電子帯のギャップ状態と共鳴し、p-Si 層から n-Si 層へのトンネル長を短くしたために発生したことが分かる。

注目すべきは、図 6(b)の 0~-0.3eV(青矢印)部分の透過率の増加である。このエネルギー領域では、量子井戸には準位はないが、図 6(c)の緑点線で囲むようにバンドギャップ内には状態密度が存在することが分かる。これら状態の解析を行うことで、これら状態は、p-Si 層の価電子帯のギャップ状態が、量子井戸が存在することであたかもその部分のバンドギャップが小さくなり、ギャップ内に深く侵入した状態であることが分かる。実際、図 6(d)に示すように、pn 接合部の価電子帯の位置を上げ人為的にバンドギャップを小さくすると、緑点線で囲むように p-Si 層の価電子帯のギャップ状態がギャップ内に深く侵入することが確認される。こうして、図 6(b)の青矢印の領域でも透過率が増大した。

以上の理論的予測を確認するために、我々は産総研の実験グループと共同研究を行い、Si-pn 接合内に SiGe 量子井戸がある場合のトンネル電流を測定した。その結果を図 6(e)に示す。量子井戸が存在すると電流は 4 桁程増大していて、我々の理論予言が正しいことが確認された。また、この実験において、0~1V の低印加電圧においても量子井戸により電流は 2 桁程増大していることが見られるが、これは図 6(c), 6(d)に示したように、量子井戸によりバンドギャップが有効的に小さくなり、ギャップ状態の侵入長が長くなったためと考えられる。

(5)ギャップ状態の消滅・変形の物理描像： 以上の成果をまとめると、界面で発生するギャップ状態の消滅・変形に関して次の点が明らかになった。(1)多くの金属/半導体界面においては、界面で並進対称性が破れ原子間結合が変化するために半導体のギャップ内にはギャップ状態が発生するが、このギャップ状態は金属の連続的なスペクトル状態とつながることでそのまま存在している。しかし、金属原子の原子半径が大きく半導体側の原子と幾何学的整合が破れたり、金属の電子密度が低く有効な原子間結合が形成されない場合は、半導体側ではダイマーなどで結合が閉じるためにギャップ状態は消滅する。

(2)電場下では、バンドギャップが有効的に減少するため、一般的には、ギャップ状態の侵入長は若干伸びる。一方、ギャップ内に不純物等の欠陥準位が存在する場合、電場がない時は欠陥準位は孤立して局在しているが、電場下の時は対称性のマッチするギャップ状態とエネルギー共鳴する。このため、ギャップ状態という観点からは、ギャップ状態の侵入長は格段に伸びる。またこの共鳴は電場が誘起する Fano 共鳴という新しい電子状態を生む。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Tomita Ami, Nakayama Takashi	4. 巻 16
2. 論文標題 Photo-carrier induced composition separation in mixed-halide CsPb(1-x)Br ₃ perovskite semiconductors; first-principles calculation	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 041002-1~5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/acc6b3	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Cho Sanghun, Nakayama Takashi	4. 巻 61
2. 論文標題 Enhancement of tunneling currents by isoelectronic nitrogen-atom doping at semiconductor pn junctions; comparison of indirect and direct band-gap systems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 124002-1~13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ac9fb0	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 S. Watanabe, Y. Tomita, K. Kawabata, T. Nakayama	4. 巻 61
2. 論文標題 Clustering feature of metal atoms in pentacene molecular solids: a first-principles study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Jpn. J. Appl. Phys.	6. 最初と最後の頁 021003-1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ac41e2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 S. Watanabe, T. Nakayama	4. 巻 60
2. 論文標題 Impacts of terminal molecules on metal-atom diffusion into alkane self-assembled-monolayer films: first-principles study	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Jpn. J. Appl. Phys.	6. 最初と最後の頁 125505-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ac3181	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 S. Cho, T. Nakayama	4. 巻 60
2. 論文標題 New types of resonant tunneling currents at Si-p/n junctions: One-dimensional model calculation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Jpn. J. Appl. Phys.	6. 最初と最後の頁 054002-1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/abf782	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 R. Nagasawa, T. Nakayama	4. 巻 60
2. 論文標題 Effect of electron transfer on metal-atom penetration into SiO ₂ in electric field: First-principles study	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Jpn. J. Appl. Phys.	6. 最初と最後の頁 031005-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/abe0f4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 S. Watanabe, T. Nakayama	4. 巻 60
2. 論文標題 Electronic structures and impurity segregation around extended defects in pentacene films: first-principles study	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Jpn. J. Appl. Phys.	6. 最初と最後の頁 SBBG05-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/abdf71	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計32件 (うち招待講演 3件 / うち国際学会 9件)

1. 発表者名 Takashi Nakayama
2. 発表標題 Resonance enhanced tunneling currents at Si-pn junctions; theoretical study
3. 学会等名 19th Conf. on Gettering and Defect Engineering in Semiconductor Technology (GADEST-19) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 T. Nakayama, A. Tomita
2. 発表標題 Formation and Optical Properties of Perovskite Semiconductor Nanodots; First-principles Theoretical Study
3. 学会等名 9th Int. Symp. on Control of Semiconductor Interfaces (ISCSI-IX) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 S. Cho, T. Nakayama
2. 発表標題 Resonance-enhanced tunneling currents at quantum-well-embedded Si-pn junctions
3. 学会等名 20th Int. Symp. on the Physics of Semiconductors and Applications (ISPSA 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 A. Tomita, T. Nakayama
2. 発表標題 Stability and optical properties of low-dimensional perovskite Cs_nPbX_{n+2} semiconductors; First-principles study
3. 学会等名 20th Int. Symp. on the Physics of Semiconductors and Applications (ISPSA 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 A. Tomita, T. Nakayama
2. 発表標題 First-principles Theoretical Study on Photo-induced Composition Separation of Mixed-halide Perovskites $CsPb(I_xBr_{1-x})_3$ for Solar-cell Application
3. 学会等名 2022 Int. Conf. on Solid State Devices and Materials (SSDM 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中山隆史
2. 発表標題 太陽電池系ペロブスカイト混晶半導体における光誘起組成分離：第一原理計算に基づく理論
3. 学会等名 2022年度多元系化合物・太陽電池研究会 年末講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 趙祥勳, 中山隆史
2. 発表標題 Si-pn接合中のSiGe量子井戸の共鳴準位によるトンネル電流の増大
3. 学会等名 第28回電子デバイス界面テクノロジー研究会 材料・プロセス・デバイス特性の物理 (EDIT 28)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 富田愛美, 中山隆史
2. 発表標題 ハライド混晶ペロブスカイト半導体 CsPb(1-xBr1-x)3 の光誘起相分離：第一原理計算による検討
3. 学会等名 第28回電子デバイス界面テクノロジー研究会 材料・プロセス・デバイス特性の物理 (EDIT 28)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Takashi Nakayama
2. 発表標題 Control of Point-defect Formation by Electric Field at Metal/semiconductor Interfaces; First-principles View (invited talk)
3. 学会等名 Int. Conf. Processing & Manufacturing of Advanced Materials (THERMEC 2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中山隆史
2. 発表標題 HfO2強誘電相の安定化：第一原理計算に基づく考察（招待講演）
3. 学会等名 第27回電子デバイス界面テクノロジー研究会（EDIT 2022）（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 富田愛美, 中山隆史
2. 発表標題 0次元ペロブスカイト半導体Cs ₄ PbX ₆ の安定性と光学的性質：第一原理計算による検討
3. 学会等名 第82回応用物理学会 秋季学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 趙祥勳, 加藤公彦, 飯塚将太, 森貴洋, 中山隆史
2. 発表標題 Si-pn 接合中の SiGe 量子井戸の共鳴準位によるトンネル電流の増大
3. 学会等名 第69回応用物理学会 春季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 富田愛美, 中山隆史
2. 発表標題 ハライド混晶ペロブスカイトCsPb(I _x Br _(1-x)) ₃ の安定性：第一原理計算による検討
3. 学会等名 第69回応用物理学会 春季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 牧芳和, 新井千慧, 洗平昌晃, 白石賢二, 中山隆史
2. 発表標題 強誘電HfO ₂ 薄膜の安定性と誘電特性:第一原理計算による検討
3. 学会等名 第69回応用物理学会 春季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 趙祥勲, 飯塚将太, 中山隆史
2. 発表標題 低次元薄膜半導体のpn接合におけるトンネル電流の振る舞い: その理論的検討
3. 学会等名 第27回電子デバイス界面テクノロジー研究会 (EDIT 2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 新井千慧, 中山隆史
2. 発表標題 酸素空孔の帯電が誘起する金属酸化物の構造変化: 第一原理計算による検討
3. 学会等名 第27回電子デバイス界面テクノロジー研究会 (EDIT 2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 加藤珠良偉, 趙祥勲, 中山隆史
2. 発表標題 半導体のpn接合における点欠陥・不純物を介したトンネル電流の理論的検討
3. 学会等名 第27回電子デバイス界面テクノロジー研究会 (EDIT 2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 西本瑛, 植田夏葉, 中山隆史
2. 発表標題 単純金属/Ge界面のフェルミレベル・デピンング: 第一原理計算による検討
3. 学会等名 第27回電子デバイス界面テクノロジー研究会 (EDIT 2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 牧芳和, 新井千慧, 中山隆史
2. 発表標題 HfO2薄膜の安定性と誘電特性: 第一原理計算による検討
3. 学会等名 第27回電子デバイス界面テクノロジー研究会 (EDIT 2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 T.Nakayama, K.Arai, Y.Shiraishi, R.Nagasawa, M.Araidai, K.Shiraishi
2. 発表標題 Charging-induced Stabilization of Ferroelectric Orthorhombic HfO2 Phase: Key Growth Processes based on First-principles Study
3. 学会等名 51th IEEE Semiconductor Interface Specialists Conference (IEEE SISC 2020) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 K.Arai, Y.Shiraishi, R.Nagasawa, M.Araidai, K.Shiraishi, T.Nakayama
2. 発表標題 Charging-induced stabilization of ferroelectric orthorhombic HfO2 films: first-principles study on key growth conditions
3. 学会等名 2020 Int. Conf. on Solid State Devices and Materials (SSDM 2020) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 S.Watanabe, T.Nakayama
2. 発表標題 Electronic structures and impurity accumulation around extended defects in pentacene films: first-principles study
3. 学会等名 2020 Int. Conf. on Solid State Devices and Materials (SSDM 2020) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 渡邊駿汰, 川端康平, 富田陽子, 中山隆史
2. 発表標題 ペンタセン膜中の金属原子クラスターの形態と安定性: 第一原理計算による検討
3. 学会等名 第68回応用物理学会 春季学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 趙祥勲, 中山隆史
2. 発表標題 p/n接合中の共鳴不純物準位によるトンネル電流の増大: 直接・間接バンドギャップ系の比較
3. 学会等名 第68回応用物理学会 春季学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 趙祥勲, 中山隆史
2. 発表標題 p/n接合中の共鳴不純物準位によるトンネル電流の増大: 直接・間接バンドギャップ系の比較
3. 学会等名 第26回電子デバイス界面テクノロジー研究会 (EDIT 2021)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 笈川拓也、中山隆史
2. 発表標題 金属酸化物中の酸素空孔の拡散と分布形態：第一原理計算に基づくその化学的傾向の検討
3. 学会等名 第26回電子デバイス界面テクノロジー研究会 (EDIT 2021)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 新井千慧、白石悠人、洗平昌晃、白石賢二、中山隆史
2. 発表標題 強誘電HfO ₂ 相の安定性における帯電と歪の複合効果：第一原理計算による検討
3. 学会等名 第26回電子デバイス界面テクノロジー研究会 (EDIT 2021)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 西本瑛、中山隆史
2. 発表標題 金属/SiC界面のショットキーバリアの界面原子による変調：第一原理計算による検討
3. 学会等名 第26回電子デバイス界面テクノロジー研究会 (EDIT 2021)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 渡邊駿汰、中山隆史
2. 発表標題 ペンタセン膜中の構造欠陥の電子状態：第一原理計算による検討
3. 学会等名 第81回応用物理学会 秋季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 笈川拓也、長澤立樹、中山隆史
2. 発表標題 遷移金属酸化物中の酸素空孔の拡散と分布の理論的検討
3. 学会等名 第81回応用物理学会 秋季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 趙祥勲、中山隆史
2. 発表標題 不純物を持つ Si-p/n接合におけるトンネル電流：3次元計算による検討
3. 学会等名 第81回応用物理学会 秋季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 新井千慧、白石悠人、洗平昌晃、白石賢二、中山隆史
2. 発表標題 帯電が誘起する強誘電直方晶 HfO ₂ 薄膜の安定性：第一原理計算による検討
3. 学会等名 第81回応用物理学会 秋季学術講演会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔出願〕 計2件

産業財産権の名称 トンネル電流駆動素子(トンネル電界効果ラジスタ及びその製造方法)	発明者 加藤公彦, 森貴洋, 飯塚将太, 中山隆史, 趙祥勲	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、特願2022-019819	出願年 2022年	国内・外国の別 国内

産業財産権の名称 半導体素子、半導体集積回路及び半導体素子の製造方法	発明者 加藤, 森, 飯塚, 中 山隆史, 趙, 加藤	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、特願2021 - 063816	出願年 2021年	国内・外国の別 国内

〔取得〕 計0件

〔その他〕

中山ナノサイエンス研究室HP
<http://phys8.s.chiba-u.ac.jp/nakayama1/index.html>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------