

■9群-4編-6章

6-1 電子輸送

(執筆著者：葛原正明) [2012年5月 受領]

半導体電子デバイスの半導体内部におけるキャリア（電子または正孔）の輸送現象を理解するためには、任意の時刻に、デバイス内部の任意の位置でのキャリアの密度、運動量、エネルギーなどの情報を知る必要がある。キャリア密度分布は実空間におけるキャリアの粗密の情報を与え、運動量分布はキャリアの運動に伴う電流計算に必要な情報を与える。また、エネルギー分布は衝突イオン化などの高電界効果の解析に重要な情報を与える。

本章では、トンネル効果やスピンなどの電子の量子性が輸送特性に直接関与する現象を無視し、その運動が古典力学で記述できる電子輸送に限定して記述する。なぜなら、今日実用化されたトランジスタの基本動作原理が、量子効果に直接結び付くものではなく、電子の位置と運動量を同時に記述できるとする古典的モデルを用いても、実質的に大きな誤りにつながる心配がないためである。

個別のキャリアの運動はニュートンの運動方程式で記述できるが、キャリアを集団として捉えた場合には、その全体の平均量を用いた方が便利である。例えば、デバイスに流れる電流は、キャリア集団の平均速度に関係した物理量である。このとき、運動量 \mathbf{p} を持つキャリアを時刻 t と位置 \mathbf{r} において見出す確率のことを分布関数と呼び、 $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ で表す。熱平衡状態における電子の分布関数はフェルミ・ディラック関数 $f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ で与えられるが、外部から電界や磁界を印加すると、分布関数は $f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ からずれる。分布関数を支配する方程式がボルツマン輸送方程式であり、次式で与えられる。

$$\partial f / \partial t \Big|_{\text{col}} = -\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f - \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f + \partial f / \partial t \Big|_{\text{col}} \quad (4 \cdot 1)$$

ここで、 $\mathbf{v} = d\mathbf{r} / dt$ はキャリア速度、 $\mathbf{F} = d\mathbf{p} / dt$ は外力である。

ボルツマン輸送方程式において、右辺の第3項は散乱項であり、非縮退半導体の場合には散乱による遷移確率 $S(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ を用いて次式のように表される。

$$\partial f / \partial t \Big|_{\text{col}} = \sum_{\mathbf{p}'} f(\mathbf{p}') S(\mathbf{p}', \mathbf{p}) - \sum_{\mathbf{p}'} f(\mathbf{p}) S(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \quad (4 \cdot 2)$$

すなわち、散乱項にも未知関数である分布関数が含まれるため、このままでは解を求めることができない。しかし、散乱が等方的または弾性的であるときは、散乱項を緩和時間で記述でき、ボルツマン輸送方程式の近似解を求めることができる。この解法を緩和時間近似と呼ぶ。

いま z 方向に一樣な低電界 F_z が印加された半導体を考える。定常状態におけるボルツマン方程式から、 z 方向の平均電子速度 $\langle v_z \rangle$ は緩和時間 τ_f を用いて次式で与えられる。

$$\langle v_z \rangle = \sum_{\mathbf{p}} v_z f / \sum_{\mathbf{p}} f = -\frac{qF_z}{nkT} \sum_{\mathbf{p}} v_z^2 \tau_f(E) f_0(E) = -\frac{q}{m^*} \frac{\langle E\tau_f(E) \rangle}{\langle E \rangle} F_z \quad (4 \cdot 3)$$

緩和時間のエネルギー依存性を $\tau_f(E) = \tau_0(E/kT)^s$ と表し、電子移動度を $\mu_e = -\langle v_z \rangle / F_z$ で定義

すると、 $\mu_e = q \langle \tau_f \rangle / m^*$ となる。ここで、平均緩和時間 $\langle \tau_f \rangle$ は次式で与えられる¹⁾。

$$\langle\langle\tau_f\rangle\rangle = \frac{\langle E\tau_f(E)\rangle}{\langle E\rangle} = \tau_0 \frac{\Gamma(s+5/2)}{\Gamma(5/2)} \quad (4 \cdot 4)$$

ここで、 $\Gamma(s)$ はガンマ関数であり、 $\Gamma(s) = \int_0^{\infty} x^{s-1} e^{-x} dx$ と与えられる。

半導体中における電子の散乱機構のうち、等方的な散乱機構として音響フォノン散乱が、また弾性的な散乱機構としてイオン化不純物散乱が知られている。各散乱機構について緩和時間のエネルギー依存性が計算されており、前者では $s = -1/2$ 、後者では $s = 3/2$ となる。異なる2つの散乱機構が同時に存在する半導体の合成移動度については、各散乱機構による移動度の逆数の和として、合成移動度 $1/\mu_n = 1/\mu_1 + 1/\mu_2$ となることが Mathiessen の規則として広く知られている。しかし、厳密に緩和時間を計算すると、エネルギーのべき乗の値が異なる2つの散乱機構の間では、実効緩和時間を数学的に簡略式で表すことができない。すなわち、Mathiessen の規則が成り立つのは、 $s_1 = s_2$ が成り立つときに限られるため、実際に用いるときには注意が必要である¹⁾。

デバイス動作において、平均速度と印加電界の比で定義されるドリフト移動度は重要な役割を果たす。一方、実験的に測定される移動度の多くは Hall 移動度である。Hall 移動度とドリフト移動度の比は Hall 因子 r_H と呼ばれ、次式のように表される。

$$r_H = \frac{\langle\langle\tau_f^2\rangle\rangle}{\langle\langle\tau_f\rangle\rangle^2} = \frac{\Gamma(2s+5/2)\Gamma(5/2)}{[\Gamma(s+5/2)]^2} \quad (4 \cdot 5)$$

この結果を用いると、音響フォノン散乱とイオン化不純物散乱について、Hall 因子はそれぞれ 1.18、1.93 と計算される。 $s = 3/2$ を持つイオン化不純物散乱では、ドリフト移動度と Hall 移動度との間で乖離が大きく注意が必要である。

前述したように、緩和時間近似を用いたボルツマン輸送方程式の解法では、(1)半導体が非縮退で放物線バンドを持ち、(2)散乱機構は等方的または弾性的であり、(3)印加される電界は低電界である場合にのみ解が得られた。上記の制限に捕われず、ボルツマン輸送方程式を厳密に解くためには数値解法が必要となる。なかでも、(1)半導体の正確なバンド構造を考慮でき、

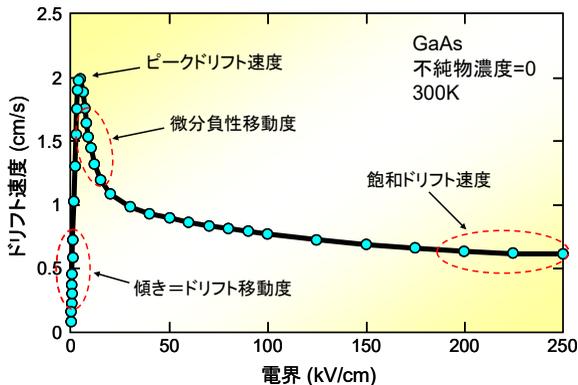


図 1・1 GaAs における電子のドリフト速度の電界強度依存性

(2) 散乱機構の種類についての制限もなく, (3) 境界条件を含む空間依存性が考慮でき, (4) 時間に依存した非定常解析が可能で, しかも (5) 高電界解析が可能な数値解法であるモンテカルロ法が有効な手法として知られている^{2),3)}. モンテカルロ法では, 電界による外力とキャリア散乱とが共に存在するデバイス内部を運動する多数のキャリアの軌跡を, 計算機の中で時間とともに追跡する. この方法を用いれば, キャリアのドリフト移動度やドリフト速度ばかりでなく, 高電界でのドリフト速度の飽和, 異なる谷間のキャリア輸送に伴う電子遷移効果 (電子速度と電界の関係における微分負性移動度), 速度オーバーシュートなどの非定常キャリア輸送, 衝突イオン化などの現象を正確に取り扱うことが可能となる. 図 1・1 に, モンテカルロ法を用いて計算した不純物を含まない GaAs における電子のドリフト速度と電界の関係を示す. 図中には, ドリフト移動度, ピークドリフト速度, 微分負性移動度, 飽和ドリフト速度を概念的に示してある.

■参考文献

- 1) M. Lundstrom : “Fundamentals of carrier transport, 2nd edition,” Cambridge University Press, 2000.
- 2) C. Jacoboni and L. Reggiani : “The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with application to covalent materials,” *Reviews of Modern Physics*, 55, pp.645-705, 1983.
- 3) W. Fawcett, A.D. Boardman, and S. Swain : “Monte Carlo determination of electron transport properties in GaAs,” *J. Phys. Chem. Solids*, 31, pp.1963-1990, 1970.