

半導体における再結合不安定性が引き起こす 非周期的電流振動

広大理 生塩 研一 八幡 英雄

1 はじめに

非線形常微分方程式で記述される系に対する理解はかなり深まってきているようだが、時空構造をもった偏微分方程式系はどう捉えればよいのだろうか。我々は、その理解に向けての一つの試みとして、実験による検証を念頭に、実験条件に近い数値シミュレーションによる研究を進めている。実際に現れる複雑な非線形現象は空間構造を伴う場合が多く、偏微分方程式による大自由度系としてのモデル化が必要となる。近年のコンピュータのめざましい進歩により、これらの数値シミュレーション研究が可能となり、同時にそれは、実験可能なモデル化によるシミュレーションを実行することで実験との比較検討が可能となってきたとも言える。半導体はこれまで非線形現象の研究対象として主流であった流体より実験系の制御が容易で、かつ、精密な測定ができる系だと考えられる。半導体は、高電場、高磁場、強い光照射などによって非常に強い励起状態におかれると、Ohm 的な電流電圧特性とは異なった非線形な輸送特性を示すようになり、電流振動、スイッチング、電流電圧特性におけるヒステリシスなどの不安定性を引き起こす。半導体における輸送特性の主な非線形性は、Ohm 則とは逆に、電場 E が強くなるほど電流密度 j が小さくなる負性微分伝導率にある。つまり、 $\sigma_{diff} = dj/dE < 0$ 。(Ohm 則の場合は、 $\sigma = dj/dE = const. > 0$)

負性微分伝導率の起源としては、種々のメカニズムが知られている [1]。例えば、ある電場しきい値を超えると電場が強くなるにつれて伝導電子のドリフト速度が小さくなる場合(ドリフト不安定性、Gunn 効果)も、負性微分伝導率により不安定性が起き、電流振動を発生する [2-4]。このとき、電流電圧特性曲線はその概形が "N" の形に似ていることから N 型特性と呼ばれる (S 型もある)。N 型の場合、均一等方的な半導体素子のバイアス方向に空間非一様な電場の空間構造(ドメイン)が形成され、その運動は発生する電流振動と密接な関係にある。ここでは、電場の上昇につれ電流に寄与する伝導電子数が減少するという再結合不安定性に起因した電流振動について考えたい。

Au をドープした n -Ge などの不純物半導体では、低温での光照射により周期的な電流振動が発生することが知られている [5-7]。そして、これらの不純物半導体では、負に帯電した不純物による伝導電子の捕獲確率が素子中に生成された電場の上昇とともに増加する特性(Field-enhanced trapping)をもち、そのため素子中の高電場領域において伝導電子が減少し、N 型電流電圧特性なる非線形性を示すことに起因すると理解されている。同じ再結合不安定性を示す Cr-doped GaAs による非周期的電流振動を実験で観測し、系を常微分方程式によりモデリングすることで説明している報告がある [8]。しかし、電流振動と密接な関係にあるドメインの運動を考慮していないため、モデリングとしては不十分であると言わざるを得ない。不純物による伝導電子捕獲確率(再結合率)は電場に対して指数的に急激な増加を示すことが既に実験的に見出されており、このことを考慮に入れ、Au をドープした n -Ge 系を Poisson 方程式、電流密度方程式、そして連続の式からなる偏微分方程式によって記述し、素子の 1 次元モデルを構築した。そして、素子の両端にかかる電位差、励起係数、再結合率などを制御パラメータとして、数値的シミュレーションを実行し、素子が発生する電流振動を調べた。

2 シミュレーション・モデル

n -Ge 中において、不純物 Au はドナーの放出した電子を 2 個引きつけて 2 価にイオン化した Au^{2-} 、そしてさらに励起されることにより電子を 3 個引きつけて 3 価にイオン化した Au^{3-} の 2 つの状態が存在する。Au、ドナー、 Au^{2-} 、 Au^{3-} の数密度をそれぞれ、 N_t 、 N_d 、 N^0 、 N^- とすると、 $2N^0 + 3N^- = N_d$ 、

$N^0 + N^- = N_t$ より、 $N^0 = 3N_t - N_d$ 、 $N^- = N_d - 2N_t$ となる。また、 $N^0 > 0$ 、 $N^- > 0$ なので N_d は $2N_t < N_d < 3N_t$ を満足する必要がある。

$e = |e|$ を電子電荷、 n を伝導電子数密度とすると、空間電荷密度は次のように表せる。

$$\rho = -e(n + 2N^0 + 3N^- - N_d) = -e(n + N^- + 2N_t - N_d) = -e(n + N^- - N_d^*) \quad (1)$$

ここで、有効ドナー密度 $N_d^* \equiv N_d - 2N_t$ を導入した。

伝導電子が陰極から陽極へドリフトすることから、空間座標は $x = 0$ を陰極、 $x = L$ (L は半導体素子の長さ) を陽極とし、1次元で、電位を $\Phi(0, t) = 0$ 、 $\Phi(L, t) = \Phi$ とした。また、Au が存在しない non-active な領域を素子の両端に設けてあり、ドメインはそこで消滅するようにした。

位置 x 、時刻 t における電流密度 $J(x, t)$ は、移流項と拡散項からなる。

$$J(x, t) = -e\{n(x, t)(-\mu)E(x, t) - D\frac{\partial n(x, t)}{\partial x}\} \quad (2)$$

ここで、 $E(x, t)$ は電場、 $\mu(> 0)$ は電子移動度、 D は拡散定数である。

電場 $E(x, t)$ は、電位 $\Phi(x, t)$ の勾配である。

$$E(x, t) = -\frac{\partial \Phi(x, t)}{\partial x} \quad (3)$$

電位 $\Phi(x, t)$ と伝導電子数密度 $n(x, t)$ は Poisson 方程式により関係付けられる。

$$\frac{\partial^2 \Phi(x, t)}{\partial x^2} = -\frac{\rho}{\epsilon} = \frac{e}{\epsilon}\{n(x, t) + N^-(x, t) - N_d^*(x)\} \quad (4)$$

ここで、 ϵ は誘電定数、 $N_d(x)$ はドナー・ドーピング密度で定常的とした。 $n(x, t)$ と $N^-(x, t)$ の時間発展は連続の式 (5)、(6) に従う。

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{J(x, t)}{-e} \right) = -\alpha_E n(x, t)\{N_t(x, t) - N^-(x, t)\} + IN^-(x, t) \quad (5)$$

$$\frac{\partial N^-(x, t)}{\partial t} = \alpha_E n(x, t)\{N_t(x, t) - N^-(x, t)\} - IN^-(x, t) \quad (6)$$

$$\alpha_E = \alpha_0 + \alpha_M \exp \left[-\left(\frac{E_{th}}{E(x, t)} \right)^2 \right] \quad (7)$$

ここで、 I は励起係数、 α_0 と α_M は再結合係数、 E_{th} は再結合しきい電場である。

連続の式 (5)、(6) の右辺第一項は、不純物 Au による伝導電子の捕獲・再結合 ($Au^{2-} + e \rightarrow Au^{3-}$) を、第二項は、光照射などによる Au^{3-} からの電子の放出 ($Au^{3-} \rightarrow Au^{2-} + e$) を示す。

パラメータは Au-doped n-Ge に対する物性値を与え、系の代表的な物理量で無次元化した偏微分方程式系に対し数値的シミュレーションを行った。数値計算には陰的差分法を用い、電位差 Φ と励起係数 I を制御パラメータとした。

3 結果と考察

電位差 Φ と励起係数 I を適当に選ぶと実験報告にもあるように電流振動が発生した。これは、再結合不安定性により陰極付近に形成された高電場領域(ドメイン)が素子両端の電位差により陽極方向へドリフトするというドメインの運動と密接な関係にある。このモデルでは、陰極付近に不安定性の成長しやすい領域を設定してあるため、陰極付近に恒常的なドメインが存在する。このドメインを残留ドメインと呼ぶ。残留ドメインが成長するパラメータを選ぶと、ある程度の大きさまで成長した後、電位差により残留ドメインを残してその領域を離れたドメインが素子中を走行する。このドメインを伝播ドメインと呼ぶ。

発現する振動モードは、残留ドメインと伝播ドメインの不安定性成長の競争で決定されると考えられる。つまり、残留ドメインが充分大きく成長すると、離れた伝播ドメインはそのパターンを崩すことなく陽極に到達できるが、充分大きく成長できなかった場合、残留ドメインの不安定性成長が伝播ドメインのそれに勝り、伝播ドメインは陽極に到達する以前につぶされてしまう。さらに、残留ドメインの成長が弱いと、パターンを維持できる伝播ドメインが形成されず、残留ドメインのみが恒常的に存在することになる。振動モードを、次の3種に分類する。ドメインが陽極に達することによりその走行時間で電流振動の周波数が決定される Transit-Time Mode、ドメインが陽極に到達できず途中で消滅することに起因する高周波な Quenched Mode、そして、ドメインが陽極方向に全く伝播せず定常的な電流値を示す Ohmic mode である。振動モードに対する Φ と I の依存性は、Fig.1 に示した。

電位差 Φ を固定して、励起係数 I を大きくすると (Fig.1 において、(G)→(D)→(A)) Transit-Time Mode → Quenched Mode → Ohmic Mode のように遷移した。この場合、励起係数の増加は、不純物 Au にトラップされた電子が伝導帯へたたき上げられやすくなるため再結合不安定性を弱くする効果に相当する。伝播ドメインだけでなく、残留ドメインもその効果を受けるが、残留ドメインのある領域は不安定性が成長しやすいようなドナー分布を与えており、伝播ドメインほど影響は強くない。従って、伝播ドメインの不安定性成長の強さが残留ドメインのそれに比べ、相対的に弱くなっていくことによるために起こったモード遷移と考えられる。

励起係数 I を固定して、電位差 Φ を大きくしていく場合 (Fig.1 において (A)→(B)→(C))、伝播ドメインがより大きく成長できるようになるため、伝播ドメインの不安定性成長が残留ドメインのそれに比べ、相対的に強くなっていくことに相当する。よって、Ohmic Mode → Quenched Mode → Transit-Time Mode のように遷移したと考えられる。

単周期振動が Φ - I パラメータ空間の大部分を占めたが、Transit-Time Mode と Quenched Mode の境界領域で周期性に変化が見られた。電流密度の時系列 (Fig.2) とそのパワースペクトル (Fig.3) から明らかなように、例えば、(E) $\Phi = 1.8[\times 10^{-1}V]$ 、 $I = 8.0[\times 10^7 \text{sec}^{-1}]$ と (H) $\Phi = 1.4[\times 10^{-1}V]$ 、 $I = 7.7584[\times 10^7 \text{sec}^{-1}]$ では2倍周期振動が、(F) $\Phi = 1.9[\times 10^{-1}V]$ 、 $I = 8.0[\times 10^7 \text{sec}^{-1}]$ では4倍周期振動が発現した。電場分布の時空間パターン (Fig.4) から、(E) の場合、主ドメインに加えて寿命の短いサブドメインが2倍周期で、(F) の場合はそれが4倍周期で現れたドメインの運動と関係していることが分かる (白さが強いほど、電場が強いことを示す)。さらに、(J) $\Phi = 1.4[\times 10^{-1}V]$ 、 $I = 7.636[\times 10^7 \text{sec}^{-1}]$ では、Fig.5(a) と Fig.5(b) から明らかなように非周期的な電流振動が現れた。電場分布の時空間パターン (Fig.5(c)) を見ると、大まかには周期性が見られるものの主ドメインとサブドメインが微妙に非周期的な運動をしており、弱いカオス的な状態になっているのが分かる。

4 結語

今回の報告では、Au をドープした n-Ge が発生する電流振動に関する数値的シミュレーションの結果を示した。伝導電子を流体的に取り扱い、空間自由度も考慮した偏微分方程式によって系を記述し、実際の物性値に近いパラメータを用いた数値計算を行った結果、Transit-Time Mode と Ohmic Mode の間に Quenched Mode があり、パラメータ空間における振動モードの境界領域で電流振動の周期性に変化が見られ、非周期的振動も発現した。今回の計算は各パラメータで熱平衡状態を初期条件にしているのので、解を引き継いで徐々にパラメータを変化させることにより多重安定性を調べたいし、非周期解の解構造の解析や非周期解へのカスケードも調べていく予定である。この数値シミュレーションは、物性値に近いパラメータを用いてあり、実験による検証が可能である。実際に観測にかかるカオスを相手にしたモデリングは、重要な示唆を与えてくれると考える。またこの系は、不安定性成長領域を限定し、そこからパルス的にドメインが放たれる系であり、そのような制限を受けない時空カオスを示す蔵本-Sivashinsky 方程式のような解とは異なったインフォメーションも得られると思われる。

References

- 1) E.Schöll: *Nonequilibrium Phase Transitions in Semiconductors*(Springer, Berlin, 1987), and the references cited therein.
- 2) K.Oshio and H.Yahata: *J.Phys.Soc.Jpn.* 62(1993)3639.
- 3) K.Oshio and H.Yahata: *J.Phys.Soc.Jpn.* 64(1995)1823.
- 4) 生塩研一, 八幡英雄: *物性研究* 61(5)(1994)547.
- 5) V.I.Stafeev: *Sov.Phys.-Solid State* 5(1964)2267.
- 6) N.G.Zhdanova et.al: *Sov.Phys.-Solid State* 8(1966)632.
- 7) V.L.Bonch-Bruevich et.al: *Domain Electrical Instabilities in Semiconductors*(Consultants Bureau,New York,1975), and the references cited therein.
- 8) K.Piragas et.al: *Sov.Phys.-Semicond.* 21(1987)335.

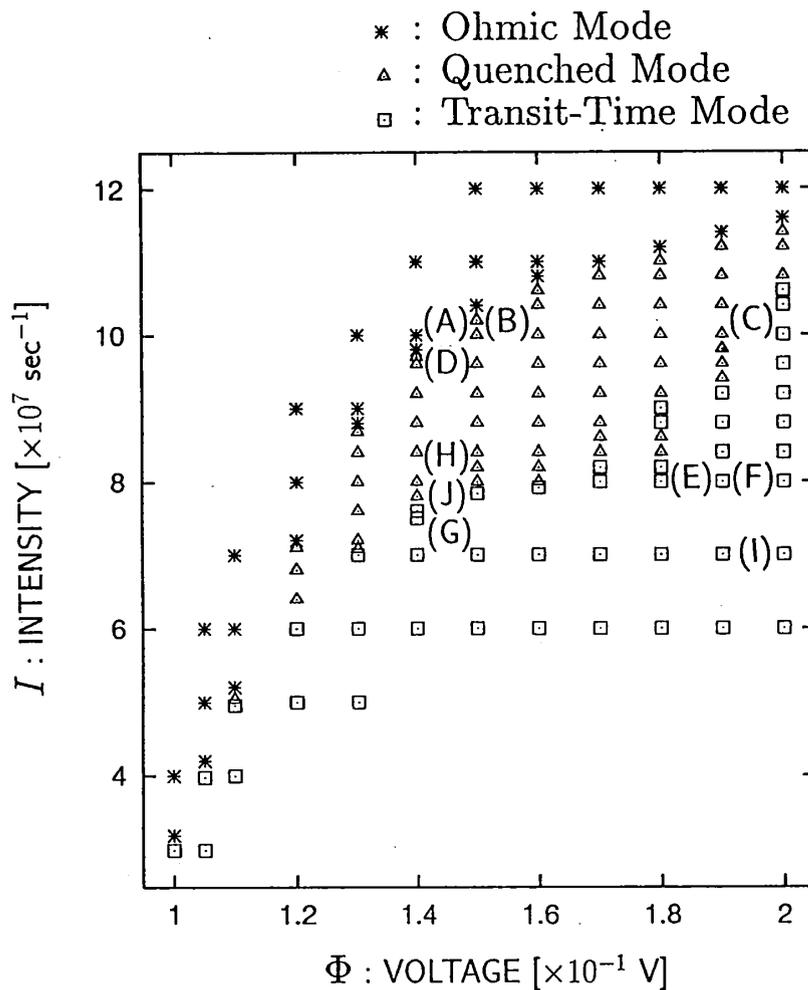


Fig.1 振動モードに対する Φ と I の依存性

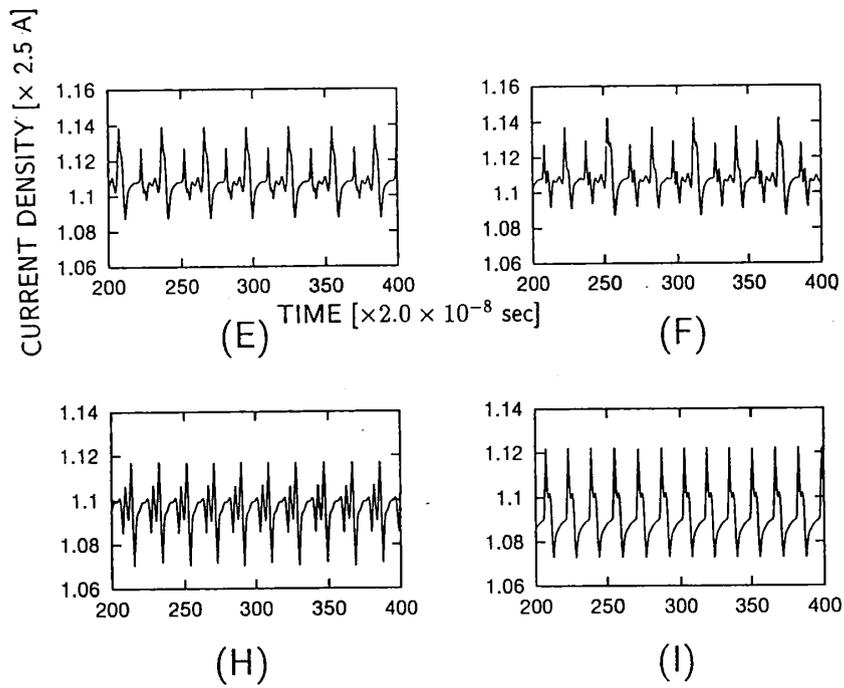


Fig.2 電流密度の時系列

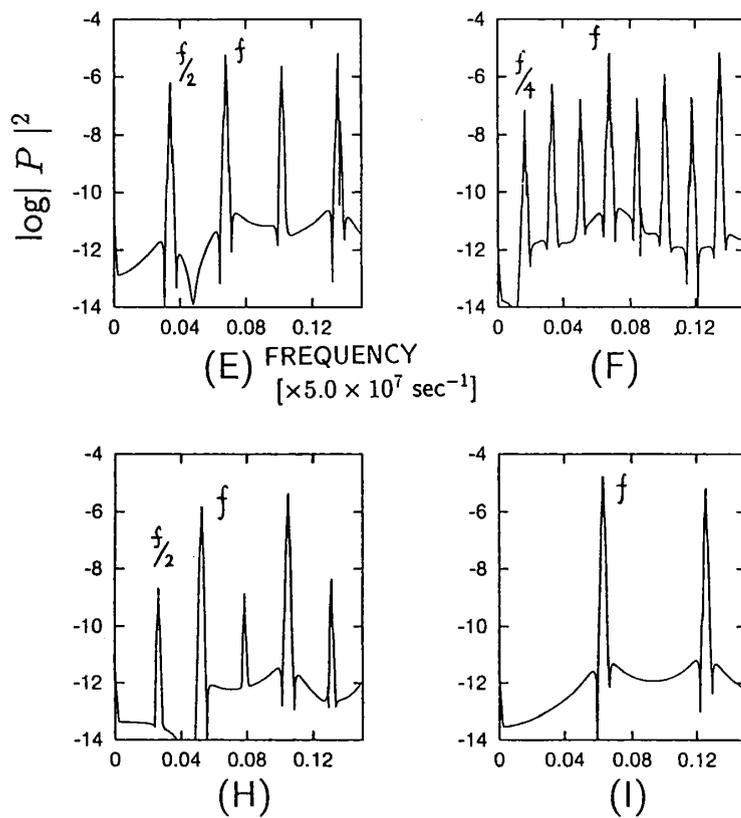


Fig.3 電流密度時系列のパワースペクトル

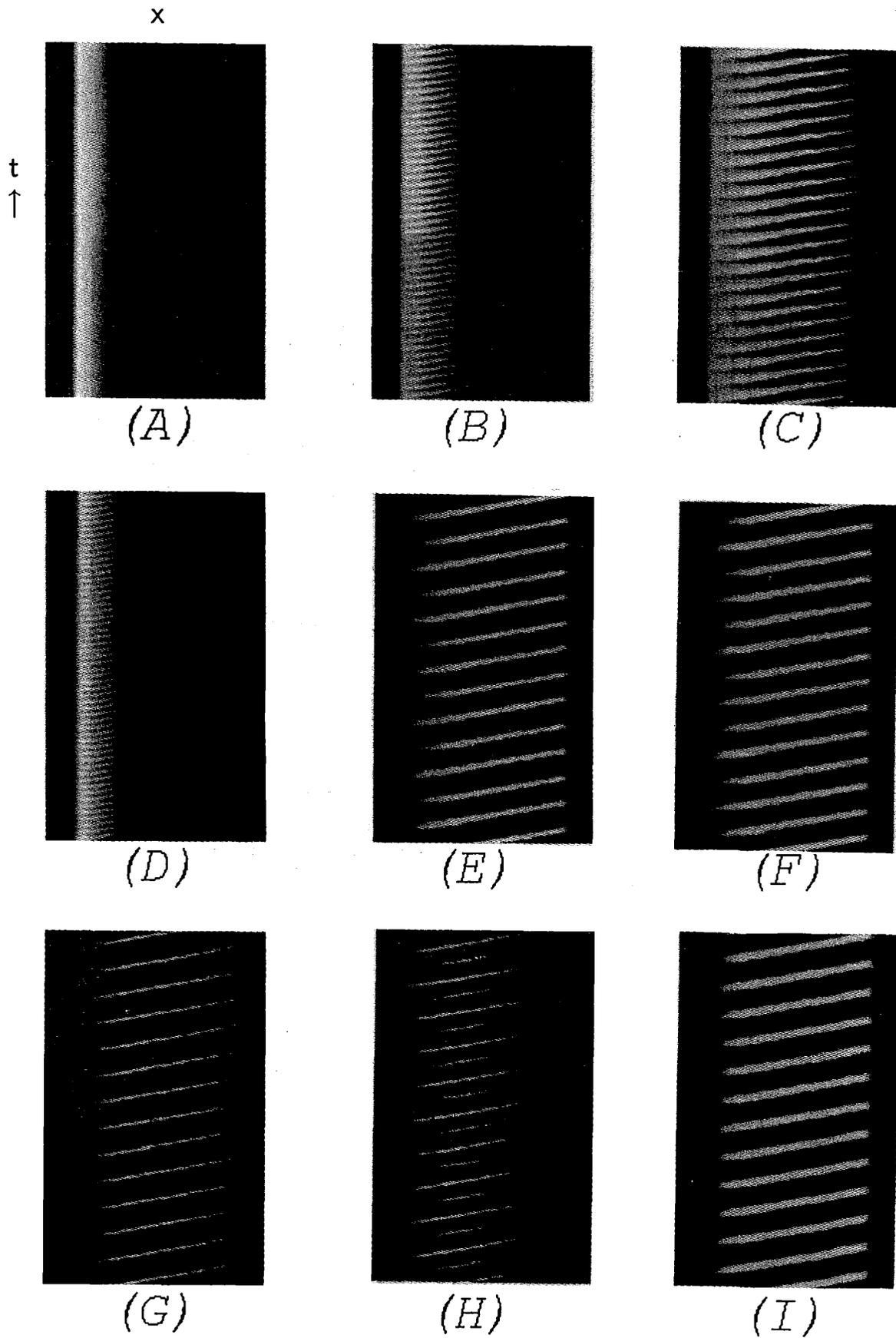
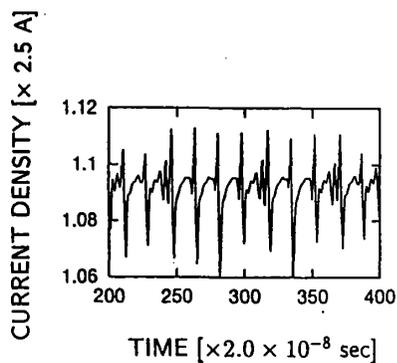
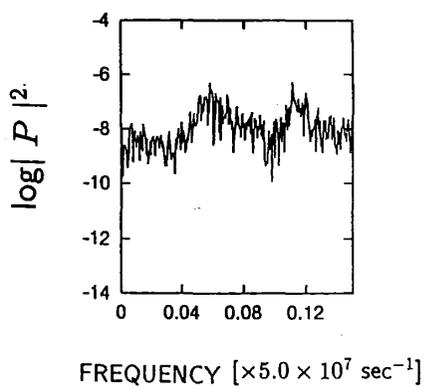


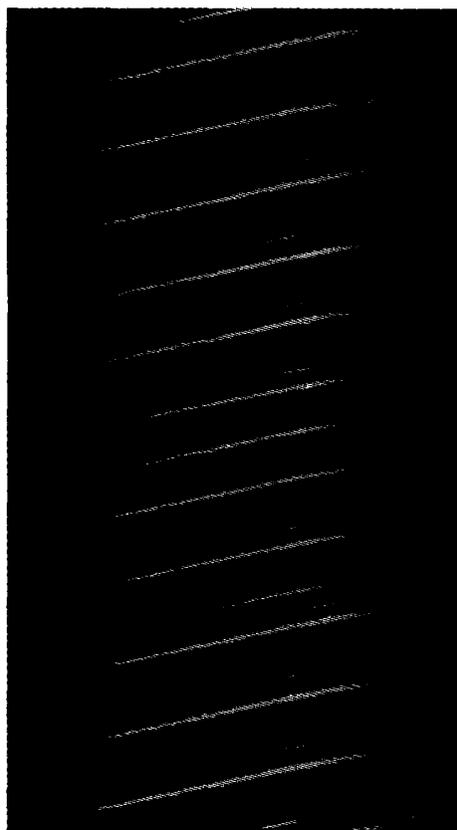
Fig.4 電場分布の時空パターン



(a)



(b)



x

(c)

Fig.5 Fig.1 の (J) 点における (a) 電流密度の時系列
 (b) 電流密度時系列のパワースペクトル
 (c) 電場分布の時空パターン