

サブ・バンド間遷移をいれた反転層内移動度の計算

学習院大・理 江沢 洋

Si MOS-FET の(100)一面反転層における室温付近での電子移動度を、電子とフォノンの変形ポテンシャル相互作用のみを考えるモデルで、次の方針、

- 1) 電子に関し、同一バレー内のサブ・バンド間遷移はすべて取り入れるが、異なるバレー間の遷移はひとまず無視して、これは後で別に考慮する、
- 2) フォノンについては、1)により音響型のものだけが問題になるが、Siが a) 自由表面をもつとした場合(サーフォン¹⁾)、 b) 弾性的には表面なしに無限の拡がりをもつとした場合(バルク・フォノン)の二つを考える — MOS構造の場合はこれらの中間にくるだろう — をとり、次の近似で計算した：
- 3) Siは弾性的に等方とする(ただし引き直した弾性定数²⁾を用いる)、
- 4) 反転層の厚さ方向(Z方向)の電子運動に対してはSternによるハートリー近似の結果³⁾ — エネルギー準位 E_α 、固有関数 $\chi_\alpha(Z)$; $\alpha = 0, 1, 2, \dots$ — を用いる。
- 5) 散乱過程における電子-フォノン間のエネルギーの受け渡しは無視する
- 6) 電子の緩和時間 $\hat{\tau}_\alpha$ (定義は後出)は、一般には電子の二次元波数ベクトル $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ α の関数であるが、いまは運動エネルギー

$\epsilon_{\mathbf{p}} = \frac{\hbar^2}{2} \mathbf{p} \hat{g} \mathbf{p}$ なる一変数の関数とする。ここに $\hat{g}$ は二行二列の行列を表わし、

$$\hat{g} = \begin{pmatrix} 1/m_x & 0 \\ 0 & 1/m_y \end{pmatrix}.$$

電子の移動度の計算にはボルツマン方程式を用いる。方針1)により一つのバレーだけに着目するので、これは以下いちいち断わらない。サブ・バンド α にある電子の二次元運動量 $\hbar \mathbf{p}$ の分布関数を $f_\alpha(\mathbf{p})$ としよう。電子が状態 $(\alpha, \mathbf{p})$ から $(\alpha', \mathbf{p}')$ 遷移する確率速度を $\Gamma(\alpha' \mathbf{p}', \alpha \mathbf{p})$ と記せば、ボルツマン方程式は

$$-\frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_{\alpha}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} = \sum_{\alpha'} \int d^2 \mathbf{p}' \{ \Gamma(\alpha \mathbf{p}, \alpha' \mathbf{p}') - \Gamma(\alpha' \mathbf{p}', \alpha \mathbf{p}) \}$$

となる。 $\mathbf{E}$ は反転層に沿ってかけた電場。 Γ は方針2), 近似3), 4)のものではサーフオンまたはバルク・フォノンの相関関数²⁾を用いて容易に算出される。いまエネルギー $\varepsilon_{\alpha} \mathbf{p} \equiv E_{\alpha} + \varepsilon \mathbf{p}$ に対する自由フェルミオンの分布関数を $f^{(0)}$ として

$$f_{\alpha}(\mathbf{p}) = f^{(0)}(\varepsilon_{\alpha} \mathbf{p}) + (e/\hbar) (\partial f^{(0)}(\varepsilon_{\alpha} \mathbf{p}) / \partial \mathbf{p} \cdot \hat{\tau}_{\alpha}(\varepsilon_{\mathbf{p}}) \cdot \mathbf{E})$$

により関数 $\hat{\tau}_{\alpha}(\varepsilon)$ を定義すれば(近似6)を参照), 考えているバレー v における電子の平均移動度 $\hat{\mu}_v$ は, よく知られた表式⁴⁾の拡張

$$\hat{\mu}_v = e g \sum_{\alpha} \langle (\varepsilon - E_{\alpha}) \hat{\tau}_{\alpha}(\varepsilon) \rangle_{\alpha} / \langle \varepsilon - E_{\alpha} \rangle_{\alpha}$$

によりあたえられるので, $\hat{\tau}_{\alpha}(\varepsilon)$ はサブ・バンド α にあるエネルギー ε の電子の緩和時間と解釈できる。ここに角括弧は, 一般にエネルギーの関数 $A(\varepsilon)$ に対して

$$\langle A(\varepsilon) \rangle_{\alpha} \equiv \int_{E_{\alpha}}^{\infty} A(\varepsilon) f^{(0)}(\varepsilon) [1 - f^{(0)}(\varepsilon)] d\varepsilon.$$

さて, 上記のボルツマン方程式は, 最低サブ・バンドのみとった場合²⁾と同様に扱うことができ, 緩和時間 $\hat{\tau}_{\alpha}(\varepsilon)$ に対する連立一次方程式をあたえる。これは近似5)のせいで ε ごとの方程式となり, $E_{\alpha} \leq \varepsilon < E_{\alpha+1}$ においては $\hat{\tau}_0(\varepsilon), \hat{\tau}_1(\varepsilon), \dots, \hat{\tau}_{\alpha}(\varepsilon)$ が未知数である。

計算は, Sternの波動関数が数値であたえられているので, 電算機で行なう。バルクにおける緩和時間 $\hat{\tau}(\varepsilon)$ が — 高温近似では — ε によらぬのに対して, 反転層での緩和時間 $\hat{\tau}_{\alpha}(\varepsilon)$ は — $E_{\alpha}, \chi_{\alpha}(Z)$ を通じて次元をもつ量が余分に加わるため — やや複雑な ε 依存性をもつ。移動度 μ ($\text{cm}^2/\text{sec} \cdot \text{volt}$) に対する結果を表1に示す — これは Si の (100) 面に対するもので, ドーピングは $N_A - N_D = 7 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, 温度は $T = 300 \text{ K}$, そして N_{inv}, N_{depl} はそれぞれ反転層および空光層内の電子数の面

表1 サーフォン散乱からきめた移動度

N_{inv}	10^{12}		10^{13}	
N_{depl}	2.708×10^{11}		2.702×10^{11}	
	N_v/N_{inv}	μ_v	N_v/N_{inv}	μ_v
Lower Valleys	0.46	3,400	0.72	2,200
Upper Valleys				
Transverse		3,200		2,400
Longitudinal	0.54	930	0.28	680
$\mu(100)_{surf}$	2,700		2,000	

密度 (cm^{-2}) を表わす。上方および下方のバレーの電子数 N_v をそれぞれ示したのは、分配が N_{inv} の増加に伴って逆転することを注意するためである。表に示した計算値はサーフォンに対するもので、バルク・フォノンを用いると 10 ~ 20 % 大きい値を得る。

この結果は方針 1) に従いバレー間の遷移を取り入れて修正すべきものである。その修正は、バルクの場合にはバレー間の遷移を無視して得た移動度を $1/2.8$ に減ずることが知られている。これを仮に反転層にも流用するとして求めた (100) 面の移動度の“計算値” μ_{cal} を川路の“実験値”に比べたのが表 2 である。この“実験値” μ_{exp} は

表2 “実験値”との比較

N_{inv}	10^{12}	10^{13}
$\mu_{cal}(100)$ $= \mu(100)_{surf}/2.8$	960	710
$\mu_{exp}(100)$	710	420

実際に測られた移動度⁵⁾ μ_{obs} (T) からフォノン散乱のみの場合の値を抜き出す目的で $\ll 1/\mu$ の加法定理 $\gg$ を用い

$$\frac{1}{\mu_{exp}} = \frac{1}{\mu_{obs}(298)} - \frac{1}{\mu_{obs}(4.2)}$$

として求めたもの。 μ_{exp} は $\mu_{obs}(298)$ と異なり N_{inv} との両対数プロットがほぼ直線となることを川路は注意している。

“計算値” μ_{cal} は“実験値” μ_{exp} よりなお 40 ~ 70 % 大きい。その理由の一つとして、上に μ_{cal} , μ_{exp} を求める際に援用したバルクの常識が反転層には通用しないことが考えられる。因子 $1/2.8$ も μ_{exp} の計算式とともに $\ll 1/\mu$ の加法定理 $\gg$ にもとずいているが、この定理は反転層ではおそらく成り立たないからである。というのは、反転層では電子運動の緩和時間は多成分の $\{\tau_a(\epsilon)\}$ であって連立一次方程式で定められるものだから —。この点は、今後に検討したい興味深い問題である。

移動度の“計算値”の N_{inv} 依存性は“実験値”のそれより弱い。これはサブ・バンドのしきい E_a の N_{inv} 依存性を考えるとバレー間遷移により正されそうに思われるが、すでに制限紙数を超えているので、ここでは立ち入らないことにする。温度依存性のほうは計算中である。

参 考 文 献

- 1) H. Ezawa : Ann. of phys. 67 (1971), 438 .
- 2) H. Ezawa, S. Kawaji and K. Nakamura : Jap. J. Appl. Phys. 13 (1974), 126 .
- 3) F. Stern : Phys. Rev B5 (1972), 4891 .
- 4) C. Herring : Bell System Tech. J. 34 (1955), 237 .
- 5) 川路 : 未発表