

講義ノート 半導体 第8回

2021.6.02 勝本信吾 東京大学物性研究所 (理学系研究科物理学専攻)

引き続き FET の動作を調べよう。ただし、pn 接合から離れて表面や界面を使用してトランジスタ動作をさせる FET を見ていくことにする。pn 接合はドーピングにより空間的一様性を破るものであるが、特にホモ接合の場合、ドーピングで接合面が決まっており、「界面」という意識が薄くまた、バルク中にできるものなので表面の影響は余り受けにくい。Schockley 達が、当時の工業技術で作製が容易で (とは言え、超高純度結晶の成長技術や、精密なドーピング技術など当時としては飛び抜けて困難な技術を要した) 安定で再現性が高い素子作製法として pn 接合を主役に据えた理由の 1 つもこの点である。これに対して、半導体技術、素子作製技術が飛躍的に高くなると、これまで厄介者扱いであった表面や界面を制御下に置いて素子動作をさせようという動きも広がり、やがて表面・界面はバルクを圧倒していくようになる。本節はこれら「現代の主役たち」を紹介する。

6.3.3 Schottky 障壁 (接合)

これまで半導体のホモ接合を考えてきた。いきなり、ではあるが、半導体と金属の接合を考えよう。接合の様子を考えるときに (安易であるが) 便利な抛り所は

1. 硬いバンド近似 (rigid band approximation) *1
2. 接合より遠方でのバルク状態への復帰
3. 平衡状態で E_F (μ) が空間的に一定

であった。金属と半導体の接合の場合、2., 3. は良いとして、1. をどう考えるかが問題になる。

半導体表面には状態密度の高い表面準位が存在することが多く、金属=半導体接合はその影響を強く受ける。しかし、ここでは次のように考えよう。「硬いバンド」の基準となるのは、金属と半導体とで電子が抵抗なく行き来できる「バンド」の端を揃えることである。が、金属と半導体とでは通常結晶構成もまるで異なり、このようなバンドは見出すことが困難である。そこで、電子を真空準位まで引き出すことを考える。これに必要なエネルギーはいわゆる仕事関数である。半導体、金属の仕事関数をそれぞれ $e\phi_S$, $e\phi_M$ とする。一般に $e\phi_M \neq e\phi_S$ である。一方、接合の条件 2. より、接合より遠方ではバルクの E_F が一致し、3. よりそれは接合付近でも一定である。

以下の手続きはもちろん物理的な過程ではなく人間が頭の中で辻褄を合わせていく様子であるが、最終的な結果は実際の接合でも同じになると考えられる (もちろん、これも大いに理想化されており、本当の現実の接合では更に状況は複雑である)。

$e\phi_M$ が $e\phi_S$ よりも大きいとする。まず、真空準位を一致させて、界面までバルクの状態を伸ばしたとすると、図 6.9 のように半導体のフェルミ準位が金属よりも高い位置に来る。これは、半導体→金属へのキャリアの流出を生じる。流出により半導体表面付近は帯電し、面垂直方向に電場が生じる。金属側も半導体からのキャリア流入に伴い帯電するが、金属側は自由電子の濃度が桁違いに高く、遮蔽長は 1 原子層以下の長さである。従って半導体からのキャリア流入に伴うバンドの傾きは無視できる。今、半導体側は n 型にドーピングされており、ドナー濃度が N_D であるとする。金属表面に蓄積している全電荷面密度を $-Q$ とすると、表面 ($x=0$) より x の距離での電場は $(eN_D x - Q)/\epsilon\epsilon_0$ であり、これによる $0 - x_d$ 間の電位差は

$$\phi(x_d) = \int_0^{x_d} (eN_D x - Q)/\epsilon\epsilon_0 dx = \frac{1}{\epsilon\epsilon_0} \left(\frac{eN_D}{2} x_d^2 - Qx_d \right) \quad (6.30)$$

*1 固体物理での通常の語法では、rigid band approximation は合金でバンド構造を混合として扱うことを指す。

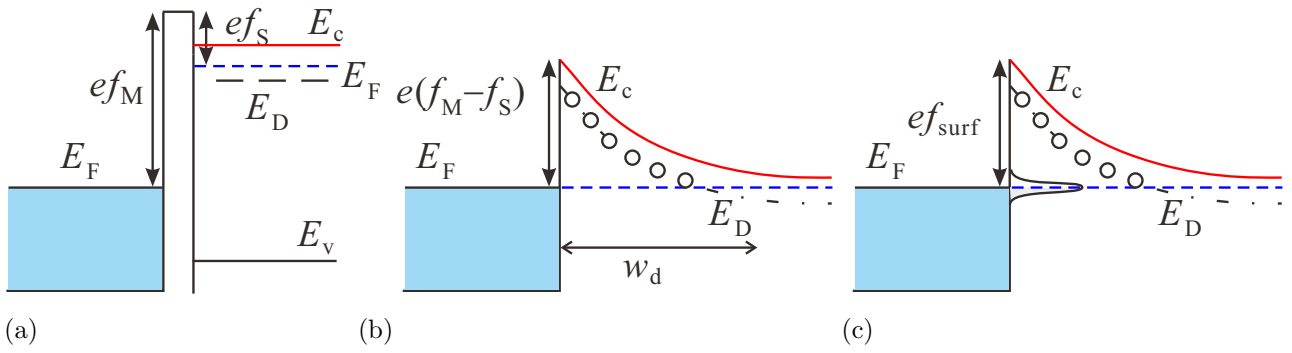


図 6.9 (a) 金属と半導体を，真空準位が一致するように接合した，と考える仮想的なバンドアラインメント．(b) 半導体表面準位がない，理想的な界面が形成された，とした場合のショットキー接合のバンド図．(c) 表面準位によるフェルミ準位のピン止めの様子を模式的に示したもの．伝導帯端 E_c からのフェルミ準位の位置は，表面準位位置 $-e\phi_{surf}$ に固定される．

である．電荷が蓄積している空乏層の厚さを w_d とすると，空乏層外で電場がゼロになる条件から， $w_d = Q/eN_D$ である．条件 $e\phi(w_d) = \phi_M - \phi_S$ より Q を決めることができ，

$$Q = \sqrt{2\epsilon\epsilon_0 N_D e (\phi_M - \phi_S)}, \quad \therefore w_d = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0 (\phi_M - \phi_S)}{e N_D}} \equiv \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0 V_s}{e N_D}}. \quad (6.31)$$

$eV_s \equiv \phi_M - \phi_S$ とした．以上によって金属-半導体界面には，電子 (p 型の場合は正孔) にとって図 6.9(b) のような障壁が生じる．これをショットキー障壁 (Schottky barrier) と呼ぶ．

半導体側に V の電圧を加えたとするとき， V はほとんど半導体側にかかると考えてよいから，半導体側から見た障壁高さは $e(V_s - V)$ に変化し，金属側から見た高さは eV_s のままである．半導体側はフェルミ縮退していないので本来は運動エネルギー分布を考えて障壁を乗り越える電子数を数えるべきであるが，ここでは簡単のため運動エネルギーが均一であるとすると，金属に対する熱電子放出式を使用して

$$J = AT^2 \left[\exp\left(\frac{e(V - V_s)}{k_B T}\right) - \exp\left(\frac{-eV_s}{k_B T}\right) \right] = eAT^2 \exp\left(\frac{-eV_s}{k_B T}\right) \left[\exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) - 1 \right]. \quad (6.32)$$

ここで， A はリチャードソン係数と呼ばれる．1 項目は半導体側からの電流，2 項目は金属側からの電流である．結局，電流電圧特性は pn 接合と類似で閾値電圧がショットキー障壁高さで決まっていることになる．

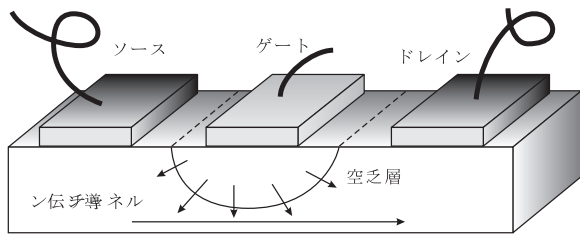
以上は半導体表面を大変に理想化した場合であったが，現実の金属-半導体接合では，やはり (6.32) と類似の電流電圧特性が得られる．ただし，(6.32) では金属を取り替えれば障壁高さに変化するはずであるが，現実には (通常の場合) 全くそのようにはならず，金属によらずほとんど常に一定の障壁高さが見られる．これは，半導体表面にエネルギー幅が狭く，非常に状態密度の高い表面準位が存在し，この状態がちょうど理想的金属-半導体界面を考えたときの金属の役割を果たして表面付近にもともと空乏層が存在するためである．このような表面に金属を接触させても，表面準位が金属の効果を遮蔽して半導体側の空乏層の様子は変化しない．この時，フェルミ準位は表面準位の位置に貼り付いた状態になる．これをフェルミ準位のピン止めという．

このように，表面準位がフェルミ準位をピン止めしてしまうと，半導体によってバンドの曲がり方が決まるため，n 型でショットキー接合ができる半導体では p 型ではできず，逆も片方しかできないことになる．実際，GaAs では p 型のショットキー接合を作ることは困難，InP では逆に n 型のショットキー接合を作るのが難しい．このような場合でも，例えば p 型の半導体のバンドを強く押し下げて n 型のチャンネルを形成する反転層が作れると両性のデバイスができるが，ショットキー接合の場合これも困難である．

6.3.4 MES-FET

III-V 族半導体の中でも電子デバイスに最も良く使用される GaAs は性質の良い酸化膜を形成しにくく，次節で述べる MOS 構造の作製が難しい．このため，ショットキー接合を使った金属-半導体 FET (MEtal-Semiconductor

FET, MES-FET) がかつては良く使用されていた。GaAs は電子の有効質量が軽く、移動度が大きいので、高速動作に向いており、マイクロ波の検波や増幅に使用されてきた。



MES-FET の構造は、左図のように単純で、伝導チャネルをショットキー接合へ加える逆バイアス電圧 (ゲート電圧) によって厚さを制限し、ソース・ドレイン間の電気抵抗を制御して信号を増幅する。ショットキー接合は次の MOS 構造に比べてゲートのリークが大きく、また、前節で述べたように、正負どちらかのキャリアに対する接合しかできないことが多いので、相補 (complementary) 回路が組めないため高密度集積には向かない。しかし、マイクロ波などの

高周波回路には依然、良く使用されている。

6.3.5 MOS 構造

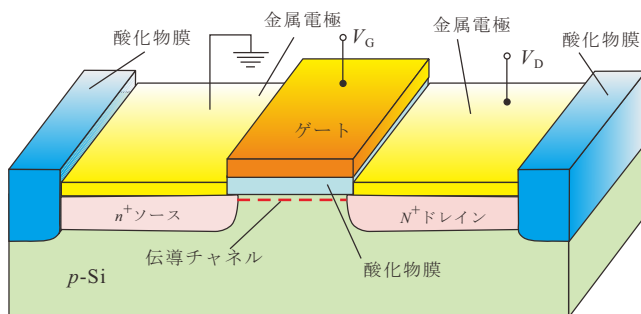


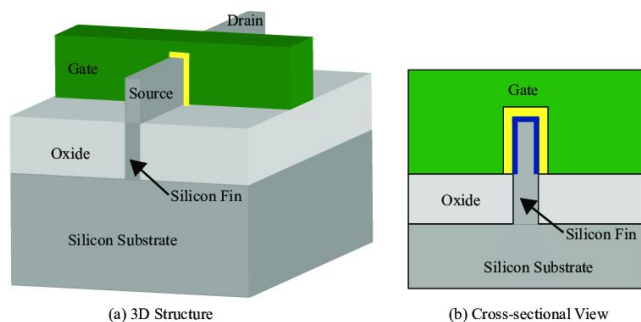
図 6.10 MOSFET 構造の概念図。熱酸化膜にリソグラフィで穴を開けて拡散させるプロセスのため、このような構造ができ上がることが多い。

金属-酸化物-半導体 (Metal-Oxide-Semiconductor, MOS) 構造は、名前の通り金属と半導体との間に絶縁体となる酸化物を挟み込んだものである。特に最も良く使用される Si には非常に安定で絶縁性の良い 2 酸化ケイ素 (SiO_2) が存在し、熱酸化によって容易に形成でき、また、p 型、n 型両方の伝導チャネルを制御でき、相補型 MOS (Complementary MOS, CMOS) 回路が構成できた。CMOS 回路は消費電力を飛躍的に下げ、集積度の上昇をもたらすことで、半導体デジタル回路の主役となった。かつては高速論理回路は、バイポーラトランジスタを使ったエミッタ結合の回路 (Emitter Coupled Logic, ECL) が主流であったが、高集積化の要求、CMOS 回路の遮断周波数の向上により、

少し以前より、いわゆるスーパーコンピュータも CMOS 論理回路を使用するようになった。

MOSFET 構造も、MESFET 同様チャネル上にゲートを配置する。MESFET のように空乏層でチャネルを潰すデプレッション型と、逆にゲートでバンドを E_F より下に押し下げて伝導チャネルを形成するエンハンスメント型がある。また、酸化物はショットキー接合に比べてはるかに高い電圧に耐えるため、バンドを大きく曲げて p 型半導体の表面に n 型の 2 次元的なチャネル (反転層, inversion layer) を作ることもできる。

Si-MOS 構造は、集積回路ばかりでなく電力素子にも進出した。ただし、最近では SiC が ON 抵抗の低い素子を作るために注目されるようになり、また、高周波電力素子では GaN 系に開発の重点が移りつつある。



6.3.6 FinFET

21 世紀に入っても半導体集積回路では、CMOS を中心として激しい集積度向上競争が続いた。他の論理回路方式に比して消費電力の点で圧倒的に有利だった CMOS も、集積度の律速は電力消費によるチップ内加熱現象になり、これを解決するために、低電圧での素子駆動が求められるようになった。このため、 SiO_2 ではなくもっと誘電率の高い絶縁膜を使って低電圧で

チャンネルの ON/OFF を可能にすることが考えられた。誘電率を κ と書いて high- κ 、あるいは high- k 材料と呼ばれる絶縁膜探しである。様々な条件から、現在ケイ酸ハフニウム、酸化ハフニウム、ジルコニアなどが使用されている。

更に、チャンネルの形状を、平面 (プレーナ) 型からフィン状にした、FinFET と呼ばれる構造が使用されるようになった。図のように、薄いチャンネルをゲートでくるんだ形であることから、表面と裏面の両方から空乏層-反転層が広がり、プレーナより高速・低抵抗スイッチすることができる。ps を切るスイッチ速度が得られている。また、素子密度を上げる上でも有効である。現在論理 LSI ではすでに主流となりつつある構造である。

6.4 半導体ヘテロ接合

Schottky 接合や MOS 構造に比較すると、類似物質の接合面であるのが異種半導体同士の接合、半導体ヘテロ接合 (heterojunction) である。これは、他に比べて急峻な有効ポテンシャル変化を実現することができ、また電子波の量子コヒーレンスを保ってポテンシャル導入ができるため、トンネル効果のような量子効果をつかう素子を実現するブロックになる。更には、結晶内に新たな周期構造を生み出し、バンド構造を人工的にいじることも考えられる。これをバンドエンジニアリング (band engineering) と称する。

この講義は半導体の物理の講義であるため、まずはヘテロ界面を物理的にどう扱うか、ということを考えていこう。

6.4.1 ヘテロ界面の有効質量近似

ここで、講師自身の教科書 [1] でも触れたやり方であるが、Bastard の教科書 [2] に従い、様々な部分を思い切り単純化して、ヘテロ界面に有効質量近似を適用する方法を考えてみる。

6.4.1.1 ヘテロ接合

半導体 A, B の接合面を xy 面にとる。A, B 2つの半導体が $z = 0$ 面 (xy 面) で接合 (A: $z < 0$, B: $z > 0$) しているとする。各領域では、Bloch の定理に従い、

$$\psi^{(A)}(\mathbf{r}) = \sum_l f_l^{(A)}(\mathbf{r}) u_{l\mathbf{k}}^{(A)}(\mathbf{r}), \quad \psi^{(B)}(\mathbf{r}) = \sum_l f_l^{(B)}(\mathbf{r}) u_{l\mathbf{k}}^{(B)}(\mathbf{r}) \quad (6.33)$$

と書けるとする。 l はバンドを表す指数で、 $u_{l\mathbf{k}}^{(A,B)}$ は単位格子の周期性を持つ関数である。話を思い切り簡単にするため、格子周期関数と各バンドの分散関係はバンドの底や頂点の位置を除いて変化しないとする。

$$u_{l\mathbf{k}}^{(A)}(\mathbf{r}) = u_{l\mathbf{k}}^{(B)}(\mathbf{r}), \quad \partial \epsilon_l^{(A)} / \partial \mathbf{k} = \partial \epsilon_l^{(B)} / \partial \mathbf{k}.$$

この単純化により、 xy 面内の 2次元ベクトルを \mathbf{r}_{xy} として、 $z = 0$ での波動関数連続条件より

$$f_l^{(A)}(\mathbf{r}_{xy}, 0) = f_l^{(B)}(\mathbf{r}_{xy}, 0).$$

xy 面内、 \mathbf{r}_{xy} の自由度に関しては、Bloch の定理より、

$$f_l^{(A,B)} = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(i\mathbf{k}_{xy} \cdot \mathbf{x}) \chi_l^{(A,B)}(z).$$

$1/\sqrt{S}$ は xy 面の平面波的部分規格化定数、 $\chi_l(z)$ が z 方向の包絡関数である。

z 方向自由度について、 $k = 0$ 周りでの $k \cdot p$ 摂動を考える。すなわち、 $k = 0$ に対して格子周期関数と離散準位を求め、 $k \neq 0$ の領域の波動関数を $k \cdot p$ に比例する摂動ハミルトニアンによって離散準位が混じる効果によって表す。 $\chi = \{\chi_j\}$ を求める方程式を、

$$\mathcal{D}^{(0)} \left(z, -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \right) \chi = \epsilon \chi \quad (6.34)$$

と書く。ただし、 $N \times N$ の演算子行列 $\mathcal{D}^{(0)}$ は

$$\mathcal{D}_{lm}^{(0)} \left(z, \frac{\partial}{\partial z} \right) = \left[\epsilon_l(z) + \frac{\hbar^2 k_{xy}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \delta_{lm} + \frac{\hbar \mathbf{k}_{xy}}{m_0} \cdot \langle l | \mathbf{p}_{xy} | m \rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle l | p_z | m \rangle \frac{\partial}{\partial z} \quad (6.35)$$

であり、

$$\epsilon_l(z) = \epsilon_l^{(A)} \quad (z < 0), \quad \epsilon_l^{(B)} \quad (z \geq 0). \quad (6.36)$$

ここで、 $|u_{m0}\rangle$ などを $|m\rangle$ と書いている。

「バンド不連続ポテンシャル」を強調して

$$V_l(z) \equiv \begin{cases} 0 & z < 0 \quad (z \in A) \\ \epsilon_l^{(B)} - \epsilon_l^{(A)} & z \geq 0 \quad (z \in B) \end{cases} \quad (6.37)$$

と書くと、結局

$$\sum_{m=1}^N \left\{ \left[\epsilon_{m0}^{(A)} + V_m(z) + \frac{\hbar^2 k_{xy}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \delta_{lm} - \frac{i\hbar}{m_0} \langle l | \hat{p}_z | m \rangle \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\hbar \mathbf{k}_{xy}}{m_0} \cdot \langle l | \hat{\mathbf{p}}_{xy} | m \rangle \right\} \chi_m = \epsilon \chi_l \quad (6.38)$$

という $\{\chi_l\}$ に関する連立方程式が得られる*2。

以上から、バンド l の包絡関数 χ_l の接続条件を考えてみる。すでに見たように、ここでは u_l が A, B で変化しないとしたため、 χ_l は界面で連続でなければならない。一方 χ_l が連続という条件下で (6.38) が更に χ_l に課す条件は、(6.38) を界面をまたいで積分することで、

$$\mathcal{A}^{(A)} \chi^{(A)}(z_0 = 0) = \mathcal{A}^{(B)} \chi^{(B)}(0), \quad (6.39)$$

の形に得られる。ただし、

$$\mathcal{A}_{lm} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\delta_{lm} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{2i}{\hbar} \langle l | p_z | m \rangle \right] \quad (6.40)$$

である。この形から明らかなように、 $k \cdot p$ の摂動を与えるバンドの混じりの項 $\langle l | p_z | m \rangle$ によって、単純な包絡関数の微分が連続、という接続境界条件は成立しないことがわかる。

6.4.1.2 包絡関数の接続

次に、今度は u やバンド分散 (有効質量) などに関する条件を緩める一方、単一バンド近似で考えてみる。有効質量方程式は 2 階の微分方程式であるから、一般的な境界接続条件は

$$\begin{pmatrix} \chi^{(A)}(0) \\ \nabla_A \chi^{(A)}(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi^{(B)}(0) \\ \nabla_B \chi^{(B)}(0) \end{pmatrix} \quad (6.41)$$

である。ただし、 a を共通な格子定数として、

$$\nabla_{A,B} = \frac{m_0}{m_{A,B}} \frac{\partial}{a \partial z} \quad (6.42)$$

である。 $T_{BA} = \{t_{ij}\}$ を界面行列と呼ぶ。

z 方向の粒子流密度は、包絡関数で決まり、

$$j(z) = \frac{\hbar}{2im^*} \left[\chi^*(z) \frac{\partial \chi}{\partial z} - \frac{\partial \chi}{\partial z} \chi(z) \right] \quad (6.43)$$

で与えられる。粒子数保存から、A, B 領域での $j(z)$ が等しくなければならない。これは次と同値である。

$$\det T_{BA} = 1. \quad (6.44)$$

*2 なお、 k の 2 次までの近似ではこれ以外にも沢山の項があるが、大変複雑になるためここでは省略した。

この条件は T_{BA} が単位行列であれば満たされるので、最も簡単には $T_{BA} = I$ とする包絡関数近似が考えられる。この場合は、包絡関数を通常の波動関数と同等に扱える。GaAs-(Al,Ga)As 界面について 1 次元強束縛模型を使って界面行列を計算すると、包絡関数近似が比較的良いことが示される。

このような場合には、物質の組み合わせによって決まるバンド不連続が存在するとして、接合面に階段関数ポテンシャルを置き、包絡関数を波動関数とする見方が成立する。これにより、積層構造によって 1 次元ポテンシャル問題、そして量子系をデザインする自由度を入手することができる。

6.4.2 Anderson のモデル

図 6.11 に模式的に示したのが、昔から長く使われてきた Anderson のモデルと呼ばれるもの*3である [3]。図 6.11(a) のように、界面ぎりぎりまで、バルクのバンドが相対位置の変化なしにつながっている、とする。界面電荷その他の効果は、電場という形でバンドの空間的な傾きで表現する。

このモデル内の重要な問題は、異種物質を接合した際に「相互のバンド位置」がどうなるかである。Anderson モデルでは、これは、図 6.11(b) のように、電子の真空準位—真空中で静止している電子のエネルギー位置—からの affinity—電子親和力と訳されることが多く、結晶中の電子状態に遷移する際に原子が集まることで低下するエネルギー—で決まる。affinity は結晶種によって決まるので、結局結晶の種類で接合のバンドのつながり方が決まることになる。図では、A, B の affinity をそれぞれ χ^A , χ^B としている。

この affinity というものが、十分良く定義できるのかどうか、できたとして、計算できるか、測定できるか、など、多くの問題があるが、ここではこの問題には入らない。異なるアプローチについては、付録 6C をご覧いただきたい。

6.4.3 接合タイプの分類

まず、ヘテロ界面業界の用語で接合のタイプを分類しておこう。図 6.12 に良く行われる 3 分類を示した。(a) がもっとも普通のタイプで、I 型 (type-I) と呼ばれる。バンドギャップの小さい方の物質から大きい方の物質へ向かって、接合面を超える際に、伝導帯の底は上昇し、価電子帯の頂上は下降するものである。これに対して、(b) のように、接合面を通過する際に伝導帯・価電子帯が同一方向にシフトするものを II 型 (type-II) という。(b) の図では、A, B 両物質共にバンドギャップ中になるエネルギー領域があったが、バンドギャップに対してシフトが大きくなる

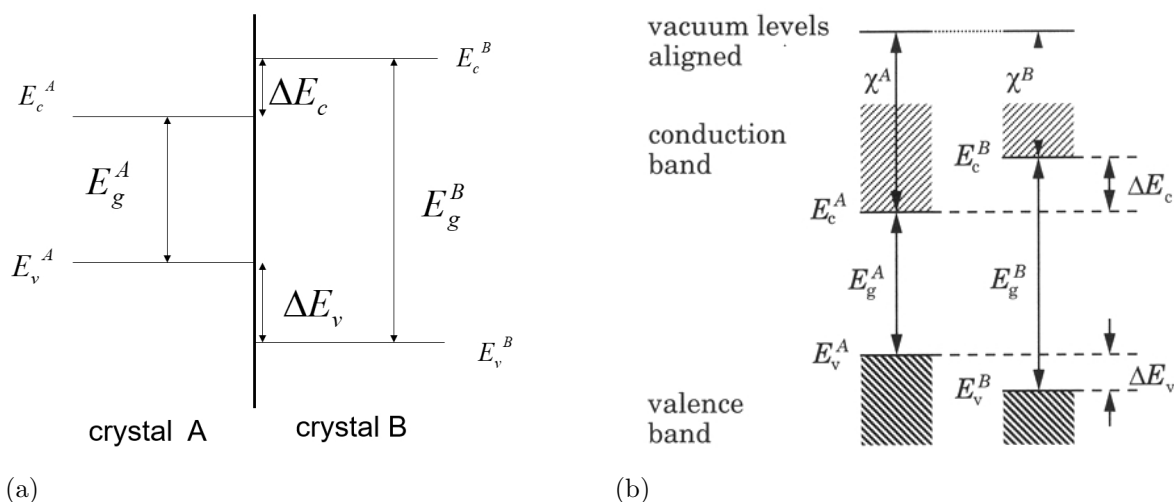


図 6.11 (a) 結晶 A, B を接合した際の相対エネルギー位置などの記号を示すダイアグラム。(b) バンドの相対位置が真空準位からの affinity(親和力?) で決まっているとする Anderson のモデル。

*3 もちろん、Bell にいたノーベル賞受賞者の有名な Philip W. Anderson とは別人。P. W. Anderson は局在スピンの Anderson model で有名だし、R. L. Anderson は IBM にいた人で、少々紛らわしい。

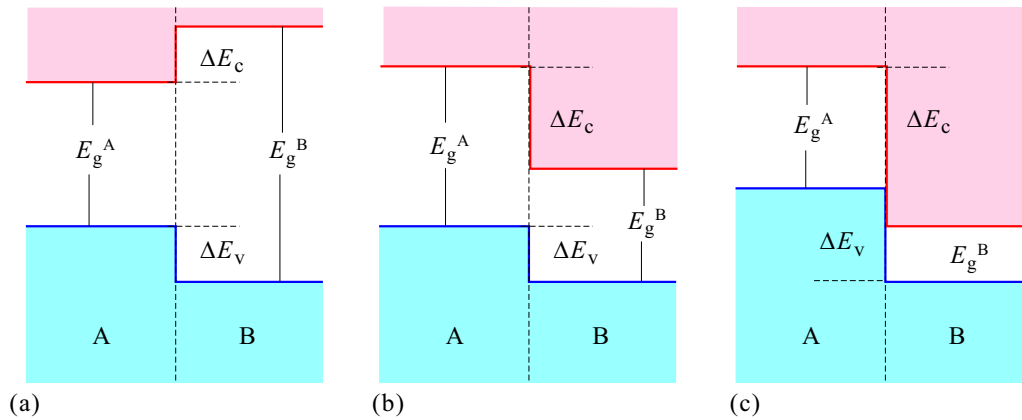


図 6.12 (a) I 型：広ギャップ側に対して，伝導帯端は上昇，価電子帯端は下降．(b) II 型：伝導帯端，価電子帯端が同じ方向に移動．broken-up あるいは misaligned．(c) III 型：II 型と同じだが，エネルギーギャップにオーバーラップがなく，片方の価電子帯と他方の伝導帯がオーバーラップしたもの．staggered．

と，(c) のように界面でバンドギャップがつぶれた形になる．日本では特にこのようなものを II 型と区別して III 型と呼んでいる．日本以外では，通常 (b) を type-II (broken-up or misaligned)，(c) を type-II (staggered) と呼んでいる．実際，[4] でも，(c) を type-II と呼んでいる．

6.5 ヘテロ接合の形成

結晶成長法の中でも薄膜成長のところで，すでに見てきたことであるが，ヘテロ接合の電子構造的な側面から，もう一度ざっと見てみよう．

6.5.1 エピタキシャル成長

ヘテロ接合の形成法として一般的なものは，第 1 回ですでに述べたエピタキシャル成長である．エピタキシャル成長には，大別して，液相，気相，真空蒸着法がある．このうち液相法は，材料物質の熔融状態から結晶基板上への析出を用いており，熱平衡に近い速くして良質な結晶の成長が可能である一方，急峻な界面が得にくい問題があり，膜厚等の精密な制御が必要な場合，後二者を使うのが一般的である．

ヘテロ接合面を形成する際に重要になるのが，結晶形の整合と格子整合 (lattice matching) である．図 6.13 は，一部の化合物半導体，元素半導体 (一部は半金属) について格子定数とエネルギーギャップをプロットしたもので，これらはブラベー格子は FCC で結晶形はほぼ同じである．灰色の帯で，格子定数が近くてヘテロ接合の形成が比較的容易なグループを示している (グループ内でどの組み合わせも積層可能というわけではない)．GaN 系の半導体のヘテロ接合も重要であるが，ウルツ鉱構造 (六方晶系) であることや高温加熱が必要なことから，窒化物系でヘテロ構造を形成することが多い．

格子不整合がある程度大きい場合でも，一定の膜厚までは界面転位が発生することなく成長する．これを，転位に集中する歪弾性エネルギーと膜全体の収縮展張による弾性エネルギーの競合点で与えるのが **Matthews** の臨界膜厚 (Matthews' critical thickness) である [5]．実際の結晶成長時には何らかの非平衡性があり，常に自由エネルギー最低点を実現する断熱変化が生じているわけではないので，これは目安に過ぎない．また，結晶成長時には基板を比較的高温に保つ必要があることが多く，熱膨張係数の違いから転位や歪が発生するなど，ヘテロ接合形成時に考える必要のある問題は非常に多い [6]．

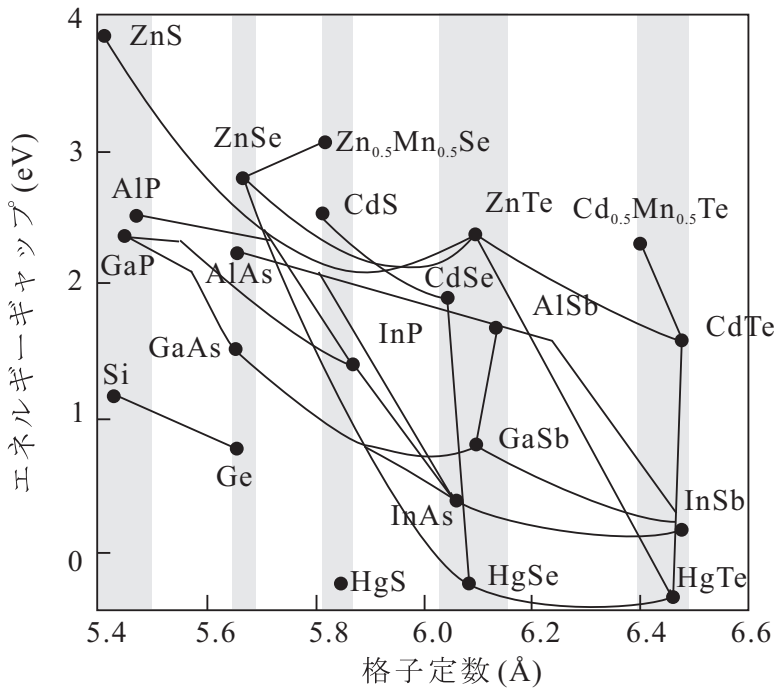


図 6.13 II-VI 族, III-V 族, IV 族半導体について格子定数とエネルギーギャップをプロットしたもの. 点を結ぶ線は, これらの間の混晶半導体を取り得る位置を示している. 縦の灰色の帯は, 格子整合が良好でヘテロ接合の可能性のあるグループを示す.

6.5.2 ファン・デル・ワールス ヘテロ構造

上記とやや異なるヘテロ構造として, ファン・デル・ワールス ヘテロ構造が注目されている [7]. これは, 図 6.14 のように, グラフェンのような 2次元物質 (グラフェンについては, ヘテロ接合以外の 2次元電子系として後で紹介する) を積み重ねて作るものである. CVD のようなエピタキシャル成長法を用いる場合もあるが, 劈開剥離で作った 2次元物質層を機械的に積み重ねることで高品質のヘテロ構造が得られることもあり, 全く新しいヘテロ構造形成法が現れる可能性がある.

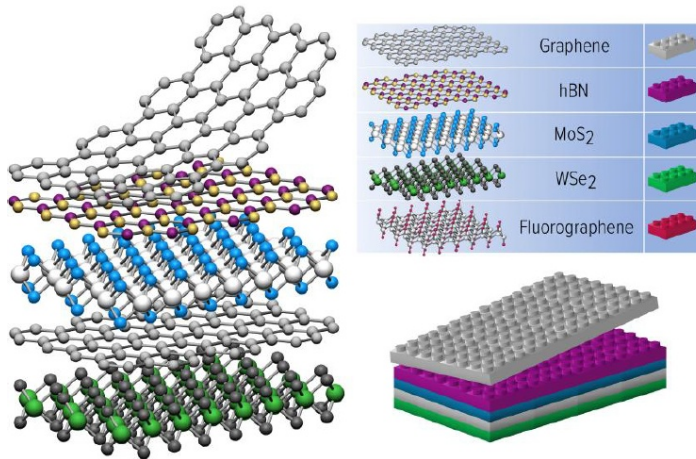


図 6.14 ファン・デル・ワールス ヘテロ構造の概念図. 様々な 2次元物質を積み重ねて作製.



第7章 量子構造（量子井戸，細線，ドット）

これまで，2次元物質であるグラフェンなど，低次元の系についても見てきた．これらは，いわば天然の低次元系であった．ヘテロ接合や金属接合，微細加工技術などを使うことで，人間の手が物質系の設計にも一定程度入るようになった．本章は，代表的な量子構造3種，2次元，1次元，0次元の系について眺めてみる．

7.1 量子井戸

2枚のヘテロ接合に挟まれてできたポテンシャルのくぼみが量子井戸 (quantum well) である．初等量子力学以来おなじみの問題であるが，半導体ヘテロ接合によって学生の練習問題から現実になったとも言える．

7.1.1 量子井戸内準位

少し学部時代のおさらいをしよう．量子井戸幅を L ，ポテンシャル障壁の高さを V_0 に取る． $x \leq -L/2$ ， $L/2 \leq x$ の領域 (井戸外) での Schrödinger 方程式は

$$\left[-\frac{\hbar^2 d^2}{2m dx^2} + V_0 \right] \psi = E \psi \quad (7.1)$$

であるから， $\kappa \equiv \sqrt{2m|E - V_0|}/\hbar$ と置くと， $C_{1,2}$ ， $D_{1,2}$ を (領域ごとに異なる) 定数として，井戸外では

$$\psi(x) = \begin{cases} C_1 \exp(i\kappa x) + C_2 \exp(-i\kappa x) & E \geq V_0 \\ D_1 \exp(\kappa x) + D_2 \exp(-\kappa x) & E < V_0 \end{cases} \quad (7.2)$$

である．

粒子が井戸を飛び出す運動エネルギーを持っておらず，概ね井戸内に留まっている $E < V_0$ の場合， $x \rightarrow \pm\infty$ で波動関数が有限でなければならないから，

$$L/2 < x \text{ で } D_1^+ = 0, \quad x < -L/2 \text{ で } D_2^- = 0$$

である．肩の土は x の正負の領域を区別するためにつけた．ここで，不連続境界 $x = \pm L/2$ での接続条件を適用する．井戸内の波動関数は， C_1 ， C_2 を定数として，

$$\psi = C_1 \exp(ikx) + C_2 \exp(-ikx), \quad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (7.3)$$

と平面波で表される．簡単のため井戸内外で有効質量 m に変化はないとした．接合面での値の連続， x に関する1階微分の連続より

$$\begin{aligned} \text{値の連続} & \begin{cases} C_1 \exp(ikL/2) + C_2 \exp(-ikL/2) = D_2^+ \exp(-\kappa L/2) \\ C_1 \exp(-ikL/2) + C_2 \exp(ikL/2) = D_1^- \exp(-\kappa L/2) \end{cases} \\ \text{微分の連続} & \begin{cases} ikC_1 \exp(ikL/2) - ikC_2 \exp(-ikL/2) = -\kappa D_2^+ \exp(-\kappa L/2) \\ ikC_1 \exp(-ikL/2) - ikC_2 \exp(ikL/2) = \kappa D_1^- \exp(-\kappa L/2) \end{cases} \end{aligned}$$

が要求される．以上から定数を消去すると，次の条件が得られる．

$$\begin{aligned} \exp(2ikL) &= \left(\frac{\kappa - ik}{\kappa + ik} \right)^2 = \exp\left(-4i \arctan \frac{k}{\kappa}\right), \\ \therefore kL &= -2 \arctan \frac{k}{\sqrt{\kappa_0^2 - k^2}} + n\pi, \quad \kappa_0^2 \equiv \frac{2mV_0}{\hbar^2}, \quad n = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (7.4)$$

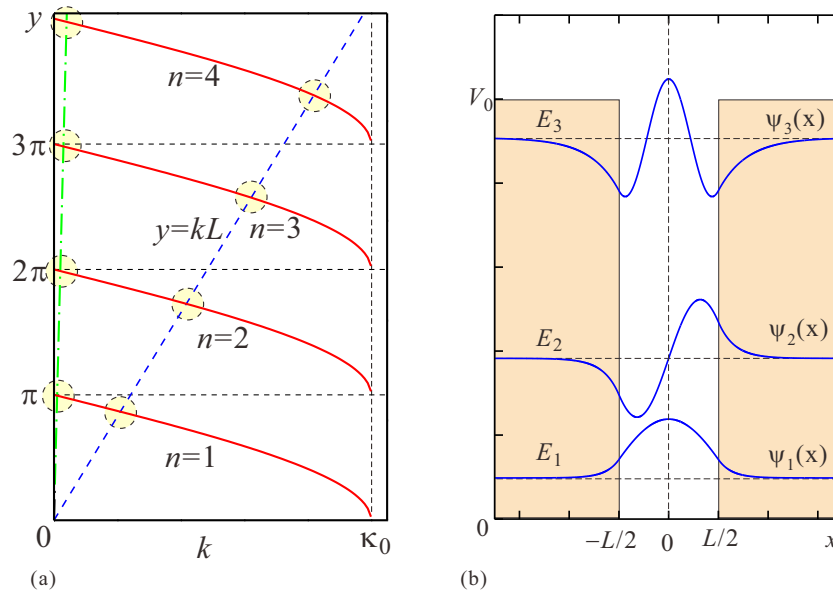


図 7.1 (a) 式 (7.4) の条件を満たす k を求めるためのプロット. k の関数として, $-2\arctan(k/\kappa) + n\pi$ と kL とを描くと, 交点の k の値が (7.4) を満たすものである. (b) $l = 8$ の条件下で得られた $n = 1, 2, 3$ の束縛固有状態を描いたもの. ベースラインはそれぞれ V_0 で測った固有エネルギー $E_{1,2,3}$. (左のグラフとは条件が異なり, 解は 3 つだけである.)

kL を正の値に取る (解には $-k$ も同等に含まれるため一般性が保たれる) こととし, $\arctan(x)$ ($\tan(x)$ の逆関数) の値を 0 と $\pi/2$ の間に制限する. 図 7.1(a) のように, $-2\arctan(k/\sqrt{\kappa_0^2 - k^2}) + n\pi$ と kL との 2 種類の曲線 (直線) の交点の k が (7.4) を満たす値である. 障壁高さ無限大の場合から容易に類推されるように, n が偶数の場合がパリティが奇, 奇数の場合がパリティが偶の状態に対応している.

この交点の解を $l = 8$ の場合について数値的に求めてこれから波動関数の形を計算して描いたのが図 7.1(b) である.

7.1.2 量子井戸光吸収

本講義では光物性には原則踏み込まないことにしているが, 量子井戸の光吸収についてちょっとだけ見ておく. 量子井戸に垂直に z 軸を取り, 量子井戸内の電子・正孔の包絡関数を, $\phi_e(z)$, $\phi_h(z)$, とすると,

$$\left. \begin{aligned} \psi_e(\mathbf{r}) &= \phi_e(z) \exp(i\mathbf{k}_{xy} \cdot \mathbf{r}_{xy}) u_c(\mathbf{r}), \\ \psi_h(\mathbf{r}) &= \phi_h(z) \exp(i\mathbf{k}_{xy} \cdot \mathbf{r}_{xy}) u_v(\mathbf{r}). \end{aligned} \right\} \quad (7.5)$$

u_c , u_v はブロッホ関数の内の格子周期関数で $\mathbf{k} = 0$ で代替している. 直接遷移の場合のバンド間光学遷移確率は

$$\langle u_c(\mathbf{r}) | \nabla | u_v(\mathbf{r}) \rangle \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi_e(z)^* \phi_h(z) \quad (7.6)$$

に比例する. この後半の積分部分は, 障壁高さが無限大で包絡関数部分が $\sin(n\pi z/L)$, $\cos(l\pi z/L)$ ($n, l = 1, 2, \dots$) となる場合, 電子包絡関数と正孔包絡関数とで \sin , \cos および指数 n , l すなわち, 量子井戸内の離散準位指数が一致している時にだけゼロでない値を取り, 離散準位指数が同じ状態間でのみ光吸収が生じる. そのエネルギーは

$$E = E_g + \Delta E_n^{(eh)} + \frac{\hbar^2}{2\mu} k_{xy}^2 \quad (7.7)$$

である. $\Delta E_n^{(eh)}$ は n 番目の量子化準位の電子正孔のエネルギーを加算したものの, $1/\mu = 1/m_e^* + 1/m_h^*$ は換算質量である. 最後の項は, 2次元系の状態密度に対応して, $\Delta E_n^{(eh)}$ で吸収が生じた後, 連続的な吸収が生じることを示している.

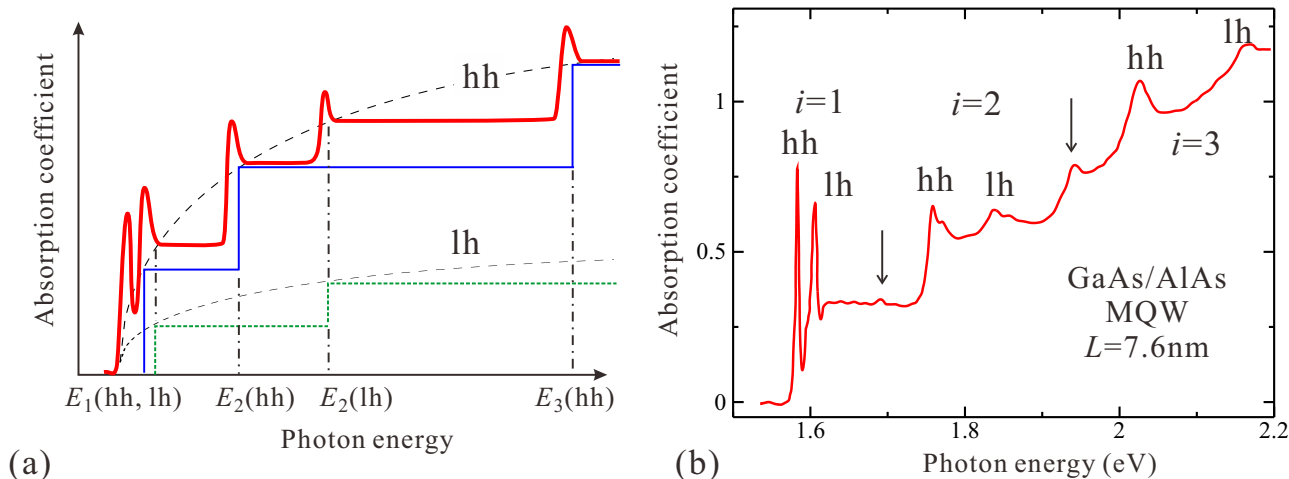


図 7.2 (a) 量子井戸の結合状態密度と励起子を考慮した吸収係数の模式図. 同じ量子数の電子・正孔波動関数間のみ遷移可能と近似し, 重い正孔, 軽い正孔に分けて描いた. (b) 井戸幅 7.6nm の AlAs/GaAs 量子井戸を 40 層並べた系で吸収係数を測定した結果. 測定温度は 6K. 矢印で示したように, 障壁高さが有限なことによる異なる量子数間の遷移による励起子ピークも現れている.

2次元系の状態密度は, $E = (\hbar^2/2m^*)k^2$, $n = \pi k^2/(2\pi)^2 = (E/4\pi)(2m^*/\hbar^2)$ より

$$\frac{dn}{dE} = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} H(E) \quad (H(x) : \text{Heaviside function}) \quad (7.8)$$

で, 定数であるから, (7.7) と合わせて, 段階的な吸収が期待される.

励起子は, 光吸収においては基礎吸収端よりも低エネルギー側の吸収ピークとして現れる. その様子を, 図 7.2(a) に量子井戸の場合に模式的に描いた. $n = 0$ の基底状態のみが現れる場合を考えている. また, 障壁が十分高く, サブバンド量子数の異なる電子正孔波動関数の結合状態密度は存在しないとしている. 図 7.2(b) は, 井戸幅 7.6nm の AlAs/GaAs 量子井戸についての実験結果である. (7.8) の 2次元の状態密度を反映した段階的な吸収係数の変化の上に, hh, lh などで示したような励起子吸収ピークが明瞭に現れている. また障壁高さが有限なために生じる異なる量子数間の遷移によるピークも見られる. 低次元化の影響は, 束縛エネルギーの増大に伴い, 励起子吸収ピークが吸収端より明瞭に低エネルギー側に離れること, 比較的高温までピークが観測されることなどに現れる.

以上から, これらの光吸収を調べることで, バンド不連続 ΔE_c , ΔE_v が実験的に求められることがわかる. GaAs-Al_xGa_{1-x}As の組み合わせで, 非常に初期の測定では試料の質のためか, lh と hh ピークが分離して現れず, このため, ΔE_v が非常に小さくて lh 準位が収容できないと解釈され, $\Delta E_c : \Delta E_v = 85 : 15$ とされていた時期もあったが, その後, この系では $\Delta E_c : \Delta E_v = 57 : 43$ が良く合う経験則であることが確かめられている.

付録 6C : バンド不連続算出の試み

計算機的能力が飛躍的に増大し, LAPW のような多くの計算機資源を要する第一原理計算も比較的気楽に行えるようになった. それでも「簡単な物理的原理を用いて, 少数の実験パラメーターから統一的にバンド不連続を得る理論を構築したい」という試みは続けられている. これまでのそのような研究を紹介するが, 多くはその後の批判や実験, 第一原理計算との対応に耐えられないことが判明している.

6C.1 共通アニオン則

この「共通アニオン」則は, イオン性のある化合物半導体について考えられるもので [8], 価電子帯が陰イオンの p 軌道が主でできているということから, 陰イオンが同じ化合物半導体同士は $\Delta E_v \approx 0$ という乱暴な議論であり, 当然ながら精度は望めないし, 場合によっては実験や他の計算と大きくずれることもある.

6C.2 擬ポテンシャル理論

Affinity に関しても、第一原理から計算することがされているが、Anderson の頃は、様々な方法で ΔE_c などを測定し、モデルに合うように affinity を決める、ということが行われていた。それに対してこれは、Frenley と Krömer によって考えられ提出された [9] 理論であり、バルクのパラメーターからバンド不連続を求めることを試みたものである。

計算法は、まず、自己無撞着擬ポテンシャル法で結晶内の静電ポテンシャルに対してバルクのバンド構造の相対位置を計算する [10]。次に、各構成原子の電気陰性度と結晶構造から、界面の静電ポテンシャルを計算し、これよりバンドの相対位置を求める、というもので、[9] では実験とも大体合っている、としている。

6C.3 LCAO 理論

Harrison が得意の原子軌道の線形結合 (LCAO) をヘテロ界面に適用したもの [11, 12]。Harrison 理論では、LCAO によってバンドが形成される。大抵の半導体は、 s 原子軌道 1 つと p 原子軌道 3 つの合計 4 つの和で表せてしまう。価電子帯頂上は、 p 軌道でできていると考え、

$$E_v = \frac{\epsilon_p^c + \epsilon_p^a}{2} - \left[\left(\frac{\epsilon_p^c - \epsilon_p^a}{2} \right)^2 + V_{xx}^2 \right]^{1/2} \quad (6C.1)$$

と表される。ここで、 $\epsilon_p^{c,a}$ はそれぞれ、cation, anion の p 軌道のそれぞれのサイト上でのエネルギー、 V_{xx} は、 p 軌道の隣接原子間の行列要素である。Harrison 理論 [11] によれば、 m を電子質量、 d を結合距離として

$$V_{xx} = 2.16\hbar^2/md^2 \quad (6C.2)$$

と近似される。この 2.16 という不思議な係数は、Si と Ge に対する別のバンド計算から得られた値 [13] にフィットするために得られたものである。

この方法では多くの半導体ヘテロ接合で価電子帯のバンド不連続が容易に計算できるため、しばしばその見積りに用いられる。比較的实验値に合うとされているが、GaAs-AlAs では $\Delta E_v=0.04$ eV となるなど (実験値は約 0.5 eV) 合わないものもある [14]。実際、(6C.1) は ϵ_p^c が共通アニオン則との主な違いになっていて、まだ相当粗い近似であることには変わりがない。

6C.4 界面双極子理論

Tersoff, Harrison が進めた理論である [15, 16, 17]。Tersoff は Harrison の LCAO 理論で、接合半導体間で電荷のやり取りがなく、双極子ができないのは現実的ではないと批判してこの理論を始めた [15] が、後に共同で双極子を取り入れた LCAO 理論を展開した [17]。Tersoff は半導体 (絶縁体) の表面では、バンドギャップ中に「電荷中性準位」のようなエネルギー位置が定義できる、と考えた。これは、価電子軌道と伝導電子軌道との寄与が一致してできるもので、金属-半導体の Schottky 接合を考えた場合、金属側の Fermi 準位と一致すべきもの、と考えられた*4。これは、ごく短距離、格子定数程度の電荷移動である。 E_F がバルクの値と一致するように生じる空間電荷のスケールとは異なる。2つの半導体を接合した場合、これらの準位が一致していれば、2種半導体間で電荷の移動はない。そのままでは一致していない場合、電荷移動によりこれらが一致する。したがって、この電荷中性準位の位置が計算できればそこからバンドオフセットも計算できることになる。

*4 実際の Schottky 接合の多くでは、表面に高密度の欠陥準位が存在し、Fermi 準位はそこでピン止めされる。欠陥の少ないヘテロ界面では事情は異なる。

	E_B	$E_F(\text{Au})^a$	$E_F(\text{Al})^a$
Si	0.36	0.32	0.40
Ge	0.18	0.07	0.18
AlAs	1.05	0.96	
GaAs	0.70	0.52	0.62
InAs	0.50	0.47	
GaSb	0.07	0.07	
GaP	0.81	0.94	1.17
InP	0.76	0.77	

^aReference 18.

(a)

	Experiments	Theory	Difference
AlAs/GaAs	0.19 ^b	0.35	0.16
InAs/GaSb	0.51	0.43	-0.08
GaAs/InAs	0.17	0.20	0.03
Si/Ge	0.20	0.18	-0.02
GaAs/Ge	0.53	0.52	-0.01

^aReference 1.

^bHowever, see text and Refs. 1, 19, and 20.

(b)

表 6C.1 (a) (6C.3) への両バンドの寄与を等分することで求めたギャップ内準位 E_B と, Sze の教科書に出て
いる, Au と Al を Schottky 電極に使った場合に実測された金属-半導体界面での E_F の位置.

電荷中性準位 (あるいは, 金属誘起ギャップ状態 (metal-induced gap states, MIGS)) の計算では, 単位胞内での
実空間平均グリーン関数

$$G(\mathbf{R}, E) = \int d^3r \sum_{n\mathbf{k}} \frac{\psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})}{E - E_{n\mathbf{k}}} = \sum_{n\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}{E - E_{n\mathbf{k}}} \quad (6C.3)$$

への価電子帯と伝導帯の寄与の大きさを調べ, これらが等しくなる E を MIGS E_B とする.

この方法で求めた E_B と, Sze の教科書にある, Au と Al を Schottky 電極に使った場合に実測された金属-半導体
界面での E_F の位置を表 6C.1(a) に示した. また, この E_B の一致から求めた価電子帯のオフセットと実測値の比較
を表 6C.1(b) に示した. この表でも一致が十分良いとは言えないが, 更に実験も含めて様々な批判が出た. 結局, 化
学トレンドなどを議論するには便利だが, デバイス設計に十分に信頼できる理論とは言い難いところである.

6C.5 第一原理計算の例

Wei と Zunger は界面のいわゆる第一原理計算を進め, 共通アニオン則, 更には単純な LCAO 理論の精度が低い
のは, 界面双極子の効果というよりも, バルクのバンド計算の粗さによる部分が大きいと主張している [19]. すなわ
ち, 価電子帯頂上 (valence band maximum, VBM) のエネルギー差 ΔE_{VBM} におけるバルクの寄与を ΔE_{VBM}^b , 表
面の寄与を ΔE_{VBM}^s と置き,

$$\Delta E_{\text{VBM}} = \Delta E_{\text{VBM}}^b + \Delta E_{\text{VBM}}^s \quad (6C.4)$$

と書くと, ΔE_{VBM}^s は小さく, LCAO 理論の問題はむしろ ΔE_{VBM}^b の見積りにあったとする. すなわち, Harrison
理論では, s , p 軌道のみ考えていたが, 特にカチオンの d 軌道の寄与はかなりの大きさがあり, これを取り入れるこ
とで, 実験との不整合はほとんど説明できる, としている (計算は, 全電子軌道を考えた一般化 LAPW 法による第
一原理計算 [20] である).

計算結果を表 6C.2 に示している. なお, LAPW 法は現在では HiLAPW や VASP など, 便利なパッケージで比
較的に使用できる (計算機リソースは沢山使用し, ジョブは重くなる). 周期系が対象であるが, ヘテロ界面の
ような場合, 界面垂直方向に単位胞を大きく取り, 界面を 2 個含むような形で周期境界条件を課して計算をする. こ

Systems	Tight-binding ^a				All-electron (Present results)					
	ΔE_{VBM}^b	ΔE_{VBM}^s	$\Delta E_{\text{VBM}}^{\text{tot}}$	$\Delta E_{\text{VBM}}^{\text{MB}}$	Average (with SO)	Average (no SO)	Using 1s	Using 2s	Using 3p _{1/2}	δ_{pd}
CdTe-HgTe	0.00	0.09	0.09	0.35 ± 0.06^b	0.37	0.39	0.377	0.388	0.400	0.34
CdTe-ZnTe	-0.07	0.00	-0.07	...	0.13	0.12	0.125	0.122	0.108	0.04
ZnTe-HgTe	0.07	0.09	0.16	...	0.26	0.29	0.277	0.286	0.289	0.30
AlAs-GaAs	0.01	0.15	0.16	0.45 ± 0.05^c	0.42	0.41	0.41	0.40	...	0.31

表 6C.2 アニオンが Te 系, および As 系での単純 LCAO, 実験, 全電子第一原理計算による ΔE_v を表にしたもの.

これはまた、超格子系について計算していることになり、包絡関数について、ヘテロ界面の階段関数がどの程度良い近似なのかをチェックすることもできる*5。

付録 6D : 再結合電流と理想因子

本文で pn 接合の電流電圧特性を議論した際、拡散電流のみを考えた。実際の pn 接合では、その他様々な要因が電流に寄与する。ここでは、接合界面に生じた空乏層内でのキャリア再結合によって流れる電流を簡単に考察する。

最初に、バンド間キャリア再結合率が高い直接ギャップ半導体を考える。バンド間のキャリア再結合率を R_e と置くと、これはキャリア濃度 p, n の両方に比例するはずである。すなわち pn 積に比例する。その比例係数を R_{rc} とすると、

$$R_e = R_{rc}pn. \quad (6D.1)$$

R_e は、暗状態で熱平衡にある場合には電子正孔対の熱励起率 G_{th} に等しい。これと半導体方程式より

$$R_{rc} = \frac{G_{th}}{pn} = \frac{G_{th}}{n_i^2} \quad (6D.2)$$

である。光励起や外部電流による少数キャリア注入などが生じると、熱励起率と再結合率は一致せず、その差が実質再結合率 U となる。n 型半導体では、正孔の濃度変化が主に問題となり、 $p_n = p_0 + \Delta p$, $n_n \approx N_D$ とすると、

$$U = R_e - G_{th} = R_{rc}(pn - n_i^2) \approx R_{rc}\Delta p N_D \equiv \frac{\Delta p}{\tau_p} \quad (6D.3)$$

である。ここで、正孔の少数キャリア寿命

$$\tau_p = \frac{1}{R_{rc}N_D} \quad (6D.4)$$

を定義した。p 型半導体中の電子の寿命は、同様に

$$\tau_n = \frac{1}{R_{rc}N_A} \quad (6D.5)$$

と定義される。

以上に対して、Si や Ge のような間接ギャップ半導体では、キャリア再結合は主にトラップを介して行われる。この場合の実質再結合率は、詳細は略すが、Shockley-Read-Hall 統計 [21] により

$$U = \frac{\sigma_n \sigma_p v_{th} N_t (pn - n_i^2)}{\sigma_n \left[n + n_i \exp \frac{E_t - E_i}{k_B T} \right] + \sigma_p \left[p + n_i \exp \frac{E_i - E_t}{k_B T} \right]} \quad (6D.6)$$

のように表される。ここで、 N_t はトラップ密度、 σ_n, σ_p は、それぞれ電子と正孔の捕獲断面積、 E_t はトラップ準位、 E_i は真性半導体のフェルミ準位である。また、 v_{th} は少数キャリアの熱エネルギー速度

$$v_{th} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m^*}} \quad (6D.7)$$

である。(6D.6) で、 U は $E_t \approx E_i$ で最大となる。実際には E_t はバンドギャップ中に分布しているが、特に E_i に近いところにトラップ準位を持つものが U に対して有効であるため*6、最も粗い近似として、一種類のトラップのみ考え、 $E_t = E_i$ とする。すると、

$$U = \frac{\sigma_n \sigma_p v_{th} N_t (pn - n_i^2)}{\sigma_n (n + n_i) + \sigma_p (p + n_i)}. \quad (6D.8)$$

*5 講師は、千葉大の中山らがこのような計算を行い、GaAs-AlAs 系については階段関数で良い、という結果を得て発表したことを覚えているが、当時の論文を発見できなかった。

*6 これは、少数キャリアの寿命は、特に間接半導体では深い準位で決まっていることを意味する。結晶 Si で solar grade と呼ばれるものは、したがって、LSI 用の $10^{-10} \sim 10^{-11}$ のような高純度は必要ではない一方、深い準位密度を抑えたものである必要がある。

バンド間遷移を考えた時と同様、 U を $\Delta p/\tau_p$, あるいは $\Delta n/\tau_n$ と書くことで、

$$\tau_p = \frac{1}{\sigma_p v_{th} N_t}, \quad \tau_n = \frac{1}{\sigma_n v_{th} N_t} \quad (6D.9)$$

となる。

ここで、式 (6.4) で導入した準フェルミ準位を使うと、式 (3.13) より、np 積は

$$np = n_i^2 \exp \frac{\mu_e - \mu_h}{k_B T} \quad (6D.10)$$

である。これを (6D.6) へ代入すると、キャリア電荷を q として、

$$U = \frac{\sigma_n \sigma_p v_{th} N_t n_i^2 \left[\exp \frac{eV}{k_B T} - 1 \right]}{\sigma_n \left[n + n_i \exp \frac{E_t - E_i}{k_B T} \right] + \sigma_p \left[p + n_i \exp \frac{E_i - E_t}{k_B T} \right]} \quad (6D.11)$$

である。再び、 $E_t = E_i$ とし、簡単のため、 $\sigma_n = \sigma_p = \sigma$ とすると、

$$U = \frac{\sigma v_{th} N_t n_i^2 \left[\exp \frac{eV}{k_B T} - 1 \right]}{n + p + 2n_i} = \frac{\sigma v_{th} N_t n_i^2 \left[\exp \frac{eV}{k_B T} - 1 \right]}{n_i \left[\exp \frac{\mu_e - E_i}{k_B T} + \exp \frac{E_i - \mu_h}{k_B T} + 2 \right]} \quad (6D.12)$$

となる。更に、 μ_e , μ_h が空間位置などに依存して変化する場合、 U が最大値を取るのは、 E_i が μ_e と μ_h とのちょうど中間に位置する時である。この時、(6D.12) は、

$$U \approx \frac{\sigma v_{th} N_t n_i^2 \left[\exp \frac{eV}{k_B T} - 1 \right]}{2n_i \left[\exp \frac{eV}{2k_B T} + 2 \right]} \approx \frac{1}{2} \sigma v_{th} N_t n_i \exp \frac{eV}{2k_B T} \quad eV > k_B T \quad (6D.13)$$

となる。最大値を取っているので、やや大きく見積もりすぎているが、再結合による電流密度を

$$j_{rc} = \int_0^{w_a} qU dx \approx \frac{qw_a n_i}{2\tau} \exp \frac{eV}{2k_B T} \quad (6D.14)$$

と得る。

式 (6D.14) を (6.11) と見比べると、指数関数項の電圧のところに因子 $1/2$ が付いていると見ることができる。これは、ごく平たく言うと、バンドギャップの「乗り越え」で電流を生じていた (6.11) の場合に対して、トラップで再結合を生じる際のエネルギーのやり取りは、その半分で良いことから生じている。このように、電流が流れるプロセスが異なると、一般に電圧の係数が異なる。そこで、実験的には順方向電流を

$$J_F \propto \exp \frac{eV}{\eta k_B T} \quad (6D.15)$$

と書いて、因子 η を理想因子 (ideality factor) として、実験にフィットさせ、 η が 1 に近ければ拡散電流が支配的な理想に近い接合、2 に近ければ空乏層内再結合電流が大きい接合、とされる。

実験室レベルでは、 η は 2 どころか、更に大きな値を示す接合ができることも稀ではない。また、pn 接合は、接合面が空乏層中間部に来ることやドーパントの相互拡散などもあり、2 に近い値が得られることが多いのに対し、ショットキー接合では、比較的 1 に近い値が得られる傾向がある。

参考文献

- [1] 勝本信吾「半導体量子輸送物性」(培風館, 2014).
- [2] G. Bastard, “Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures” (Editions de Physique, France, 1990).
- [3] R. L. Anderson, IBM J. Res. Dev. **4**, 283 (1960); Solid-State Electronics **5**, 341 (1962).
- [4] C. Liu *et al.*, Phys. Rev. Lett. **100**, 236601 (2008).
- [5] J.E. Matthews, A.E. Blakeslee, J. Crystal Growth **27**, 118 (1974).
- [6] H. C. Casey, Jr., M. B. Panish, “Heterostructure Lasers” Part B (Academic Press, 1978).
- [7] A. K. Geim and I. V. Grigorieva, Nature **499**, 419 (2013).
- [8] A. G. Milnes and D. L. Feucht, “Heterojunctions and Metal Semiconductor Junctions” (Academic Press, 2012).
- [9] W. R. Frensley and H. Kroemer, Phys. Rev. B **16**, 2642 (1977).
- [10] M. L. Cohen and J. R. Chelikowsky, “Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors” (Springer, 1989).
- [11] W. A. Harrison, J. Vac. Sci. Tech. **14**, 1016 (1977).
- [12] W. A. Harrison *et al.*, Phys. Rev. B **18**, 4402 (1978).
- [13] D. J. Chadi and M. L. Cohen, phys. stat. solidi (b) **68**, 405 (1975).
- [14] 竹田 美和, 応用物理 **67**, 1077 (1998).
- [15] J. Tersoff, Phys. Rev. B **30**, 4874 (1984).
- [16] J. Tersoff, Phys. Rev. Lett. **56**, 2755 (1986).
- [17] W. A. Harrison and J. Tersoff, J. Vac. Sci. Tech. B **4**, 1068 (1986).
- [18] S. M. Sze and K. K. Ng, “Physics of Semiconductor Devices” 3rd ed. (Wiley, 2008).
- [19] S.-H. Wei and A. Zunger, Phys. Rev. Lett. **59**, 144 (1987).
- [20] S.-H. Wei, H. Krakauer, and M. Weinert, Phys. Rev. B **32**, 7792 (1985).
- [21] W. Shockley and W. T. Read, Phys. Rev. **87**, 835 (1952); R. N. Hall, Phys. Rev. **87**, 387 (1952).