



Title	Si反転層内における電子移動度に関する研究
Author(s)	正木, 和夫
Citation	大阪大学, 1992, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.11501/3064572
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

Si反転層内における
電子移動度に関する研究

平成4年

正木和夫

目次

第1章 序論	1
1-1 はじめに	1
1-2 歴史的背景	2
1-3 本研究の目的	4
1-4 本論文の構成	5
第2章 二次元電子ガス状態の自己無撞着解法	11
2-1 緒言	11
2-2 有効質量方程式	12
2-3 有効質量と縮重度	13
2-4 二次元電子ガス状態の自己無撞着な解法	18
2-5 近似的解法	23
2-5-1 三角ポテンシャル近似	23
2-5-2 変分法による解	24
2-6 自己無撞着解法による計算結果と検討	26
2-7 結言	41
第3章 二次元電子ガス状態の散乱過程に関する理論的考察	43
3-1 緒言	43
3-2 ボルツマンの輸送方程式	44
3-3 衝突項と緩和時間	46
3-3-1 縮退を考慮しない場合	46
3-3-2 縮退のある場合	48
3-4 二次元電子ガスの移動度	50
3-5 電子とフォノンの相互作用	53
3-5-1 三次元電子とフォノンの相互作用	54
3-5-2 二次元電子ガスとフォノンの相互作用	57
3-6 二次元電子ガスと音響フォノンの相互作用	59
3-7 二次元電子ガスとインターバレーフォノンの相互作用	63

3-7-1 縮退を考慮しない場合	63
3-7-2 縮退を考慮した場合	65
3-8 表面粗さ散乱	66
3-9 イオン化不純物散乱	68
3-10 イオン化不純物による遮蔽効果	71
3-11 結言	75
第 4 章 Si 反転層内移動度	77
4-1 緒言	77
4-2 実験と結果	79
4-3 検討	84
4-4 結言	86
第 5 章 Si 反転層内における電子移動度の理論的解析	88
5-1 緒言	88
5-2 二次元電子ガス移動度の解析式の導出	89
5-3 垂直電界依存性	96
5-4 温度依存性	102
5-5 縮退を考慮した二次元電子ガス移動度	107
5-6 結言	110
第 6 章 Si 反転層内における移動度のユニバーサル性	113
6-1 緒言	113
6-2 基板バイアス電圧と基板不純物濃度に関するユニバーサル性	114
6-3 基板バイアス電圧と基板不純物濃度に関するユニバーサル性の検討	121
6-4 結言	130
第 7 章 結論	132
謝辞	134
研究業績	135

第 1 章 序論

1-1 はじめに

近年の Si MOSFET (Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor) の集積化の進歩は著しく、超微細加工技術に基づいて最近では、最小加工寸法が $0.5 \mu\text{m}$ 以下の高密度集積回路が研究所レベルで開発されるに至った。比例縮小則 (scaling rule)¹⁾ から、素子寸法を $1/K$ にすると集積度は K^2 に、速度は K 倍に、消費電力は $1/K^2$ となり、素子寸法を小さくすればするほど長所がある。しかし、素子微細化に伴い短チャンネル効果による素子の性能や信頼性の低下が問題なってきたり、素子製造プロセスや回路が複雑になり素子設計の困難さが増大してきている。このため、計算機により素子特性を予測するデバイスシミュレーション技術が必要不可欠な分野の一つとなってきた。素子開発において、素子を実際に試作する代わりにシミュレーションを用いて素子特性の予測ができれば開発期間と費用を大幅に低減できる。また、シミュレーションでは素子内部の電位分布や電子分布が二次元、三次元的に把握でき現象の解析ができるので、これまでに α 線のソフトウェア解析²⁾、 $0.5 \mu\text{m}$ MOSFET の高精度な動作解析³⁾、および非定常な電子輸送現象⁴⁾ の解析に威力を発揮している。

Si MOSFET のデバイスシミュレーションにおいてドレイン電圧ードレイン電流特性を得るためには、いくつかの物理モデルを用いて電流連続とポアソンの式を連立して解いている。これらの物理モデルの中の電子移動度は半実験的な式が用いられている。Si MOSFET 反転層内における電子は非常に狭い層に閉じ込められ二次元的な運動をすることが知られており、低温におけるこの電子の振る舞いについては Schubnikov-de Haas 振動や量子ホール効果でよく研究されてきた。しかし、高温におけるこの電子の振る舞いについては、バルク Si の移動度が室温において $1300 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{sec}$ という値を持つのに対し、MOSFET の移動

度は約 1/2 であり、しかもゲート電圧依存性があることなど、まだ十分な物理的解釈がなされていない。デバイスシミュレーションの精度を上げるためには、物理モデルの妥当性と精度を上げることが大切であり、高温における移動度を物理的に説明することが重要な課題となっている。

1-2 歴史的背景

Si MOSFET の電気的特性の中で重要なパラメータの一つに移動度がある。Si 反転層内における電子移動度は非常に狭い表面層内の電子状態とこの電子の散乱現象で決定される。1955 年、Schrieffer⁵⁾ により初めて、分散散乱モデルを仮定したボルツマン輸送方程式を解くことにより、半導体表面の薄い層内に閉じ込められた電子の移動度について調べられた。それによると、半導体表面のポテンシャル井戸層におけるキャリアの移動度は、半導体表面に垂直な電界が大きくなるにつれて低下する。その後、1957 年、Schrieffer⁶⁾ は表面ポテンシャル井戸層における電子は表面に垂直な方向に量子化される可能性について述べ、準位間隔は散乱による準位の広がり ($\Delta E \sim \hbar/\tau$) に比して十分大きくないので量子効果は観測されないと予測している。1960 年代初期の Si プレーナー技術の発展により良質なシリコン酸化膜と界面が作られるようになって安定した電気的特性が得られるようになった。1966 年、Fowler *et al.*⁷⁾ は Si (100) 面の MOSFET を用いて 4.2 K の極低温で Schubnikov-de Haas 振動を測定し、Si 反転層における電子の量子化を実験的に証明した。これが端緒となって以後極低温において、サイクロトロン共鳴⁸⁾、光伝導効果⁹⁾、歪抵抗効果¹⁰⁾ などの方法を用いて量子化の実験的な証明がなされてきた。一方、高温における電子の量子化については、Sato *et al.*¹¹⁾ により Si 反転層におけるキャリア移動度の大きさが結晶の面方位や電流方向に依存するのは量子化による有効質量の大きさの差異により生じていることが示された。また、Sakaki と Sugano は¹²⁾ Si (111) 面の MOSFET を用いて磁気抵抗効果の磁界方向依存

性の測定から、液体窒素温度ではゲート電圧の大きさにかかわらず量子化がされており、室温においてはゲート電圧が大きいときは量子化されているが、ゲート電圧が小さくなると量子化されていないことを示した。1972年、Stern¹³⁾により Schrödinger 方程式と Poisson 方程式を自己無撞着に解く方法が提案され、表面量子化された二次元電子ガスの波動関数、サブバンドエネルギー、各サブバンドにおける電子占有率などが数値計算で得られるようになり、実験結果を定量的に解析することが可能となった。

このように、反転層内におけるキャリアの表面量子化された二次元的な性質に関する研究がなされているなかで、1968年、Fang と Fowler¹⁴⁾により Si 反転層内で 4.2 ~ 300 K の広い温度範囲における電子の電界効果移動度、実効移動度、およびホール移動度に関する総合的な実験結果の報告がなされた。一方、Stern と Howard¹⁵⁾は低温でかつ低電子密度領域においてスクリーニングを考慮した固定電荷と基底準位にある二次元電子ガスとの相互作用による理論的解析を行い、また Kawaji¹⁶⁾は局在した音響フォノンと変形ポテンシャルを介して基底準位の二次元電子ガスとの相互作用によるモデルで室温における移動度の反転電子密度依存性がよく説明できることを報告した。局在した音響フォノンの代わりにサーフォノンやバルクフォノンと二次元電子ガスとの相互作用に関しては Ezawa *et al.*¹⁷⁾らに詳細な理論が発展させられた。Price¹⁸⁾は三次元フォノンと二次元電子ガスとの相互作用に関して、厳密な理論解析法を提案した。Ferry¹⁹⁾は0次と1次近似のインターバレーフォノンによる散乱確率の式を導びいたが、その中に含まれる重なり積分について、理論的根拠をはっきりとは示しておらず、Price¹⁸⁾の方法がより合理的である。この方法は Ridley²⁰⁾が独立に導いた結果と一致しており、その後、Price と Ridley の手法が使われるようになった。低温領域ではクーロン散乱以外に表面粗さによる散乱の重要さが Hartstein *et al.*²¹⁾に指摘され、Matsumoto と Uemura²²⁾や Ando²³⁾らにより表面粗さと二次元電子ガスとの

相互作用の理論が発展させられて来た。

1-3 本研究の目的

Si MOSFET のデバイスシミュレーションにおいて、drift-diffusion モデルを用いてドレイン電流を計算する場合、移動度の垂直電界依存性をどのようにモデル化するかによってシミュレーションの精度が決まる。移動度の簡単なモデル式としてバルク Si において Scharfetter と Gummel²⁴⁾ の提案した移動度の不純物濃度依存性の式があり、その移動度の不純物濃度依存性のモデル式に対し、Yamaguchi²⁵⁾ は Thornber²⁶⁾ のスケーリング理論に基づいて、垂直電界依存性を付加した移動度の実験式を示した。Cooper と Nelson²⁷⁾ は time of flight 法を用いて測定したドリフト速度の垂直電界依存性とチャネル方向電界依存性を表すドリフト速度と移動度の実験式を示し、Thornber のスケーリング理論を実験的に証明した。Schwarz と Russek²⁸⁾ は量子力学的チャネル層幅の温度依存性を考慮した電子移動度の半実験式を提案している。これらの実験式はデバイスのシミュレーションに良い結果を与えているが、その物理的な解釈は十分になされていない。Shirahata と Hamaguchi²⁹⁾ は、Cooper と Nelson²⁷⁾ が測定した電子移動度の垂直電界依存性は二次元電子ガスとフォノンとの相互作用における電子の量子効果でよく説明できることを示した。Takagi *et al.*³⁰⁾ はさまざまな Si 基板不純物濃度の試料を用いて測定した電子移動度の垂直電界依存性の高電界領域で、表面粗さ散乱による移動度のおおきな低下を報告している。一方、電子移動度の温度依存性において、高温領域では電子移動度が $T^{-(1\sim 2)}$ に依存するという実験結果が報告されているが^{14,31,32)}、二次元電子ガスと音響フォノンとの相互作用では T^{-1} となり^{16,17)} その原因はまだ明確にされていない。本研究では電子移動度の実験結果と理論計算結果とを比較検討することによって移動度の物理モデルを明かにする。

移動度を測定するに当たって同じ試料を用いて、電気特性の評価では一般的に用いられ

ているコンダクタンス法と、それと原理の異なるホール効果で測定して移動度の精度と有効性を検討する。Si 反転層内における電子輸送現象の散乱機構を明らかにするために移動度を極低温から室温の領域で測定する。電子移動度の計算として、まず、反転層内の二次元電子ガス状態を自己無撞着解法により求め、二次元電子ガスと実験から得られた主な散乱機構、すなわち音響フォノン、インターバレーフォノン、表面粗さ、およびイオン化不純物との相互作用に基づいた移動度の計算方法を示す。実験から得られた電子移動度と計算結果とを比較検討し、計算に用いた物理モデルの評価を行う。

さらに、同じ物理モデルを用いて基板バイアス効果や基板不純物濃度に関するユニバーサル性について移動度を定量的に検討する。

1-4 本論文の構成

2章では、電子が Si 反転層の狭いポテンシャルの井戸層に閉じ込められた電子の伝導現象を解析するために必要な電子の波動関数、サブバンドエネルギー、電子占有率を求める方法と計算結果について述べる。それは、有効質量近似の仮定のもとで得られた Schrödinger 方程式と Poisson 方程式を自己無撞着に解く方法を採用するのでその手法について述べ、一例として Si (100) 面の反転層における計算結果を示す。また、近似的な解法として、表面電界を一定とした三角ポテンシャル近似と電気的量子限界を仮定した変分法について述べる。

3章では、Si 反転層内の電子移動度を理論的に計算する方法について述べる。まず、ボルツマンの輸送方程式から、外力が小さく電子の分布関数のずれが熱平衡状態から十分小さいとして緩和時間近似を用いて、電子の散乱緩和時間のエネルギー平均値を表す式を示す、このとき電子が縮退していない場合と縮退している場合について計算方法を述べる。個々の散乱因子による散乱確率を求める前に、三次元電子とフォノンとの相互作用を調べ、Price のモデルに従い二次元電子ガスとフォノンとの相互作用を求める。最後に、二次元電子ガス

と音響フォノン、インターバレーフォノン、表面粗さ、およびイオン化不純物による相互作用の散乱確率について述べ、特にインターバレーフォノン散乱の場合、散乱前後の電子のエネルギーが大きく変化するので、縮退を考慮した場合の散乱確率についても考察する。

4章では、ホール効果とチャンネルコンダクタンス法の二つの異なる方法を用いて移動度を測定し、測定された移動度の有効性と正確さを検討する。その結果、ほぼ移動度の値が一致したので移動度の解析にはチャンネルコンダクタンス法により垂直電界依存性と温度依存性を測定した。15 ~ 300 K の温度範囲で求めた移動度の垂直電界依存性から低温と高温で大きく特性が変わることを示す。このことは、低温領域において、低電界領域で移動度が立ち上がっていることからイオン化不純物散乱におけるスクリーニング効果が重要であり、高電界では移動度が E_{eff}^{-2} の特性になることから、表面粗さ散乱が寄与していることが明らかになった (E_{eff} は実効的な垂直電界)。一方、高温領域においては一般的にフォノン散乱が寄与することが知られているが、移動度の温度依存性において 100 K より高温側で $\mu_{\text{eff}} \propto T^{-n} (n > 1)$ となっていることから音響フォノン散乱に加えてインターバレーフォノン散乱を考慮する必要性のあることを示す。

5章では、3章で述べた電子移動度の理論に基づき、音響フォノン、インターバレーフォノン、表面粗さ、およびイオン化不純物による四つの散乱機構を含んだ Si 反転層内の電子移動度の計算方法を示す。Schrödinger と Poisson の両方程式を自己無撞着に解くことにより二次元電子ガスの状態を求める。その結果、各サブバンドにおける電子占有率の計算ではエネルギーの最も低い二つのサブバンドに占める電子の割合が 85 % 以上となることを示し、移動度の計算にはこの二つのサブバンドを考慮すればよい近似となることを示す。二次元電子ガスの性質から音響フォノン、インターバレーフォノン、および表面粗さによる散乱確率はエネルギーに関しステップ関数となり、又、状態密度関数はエネルギーに依存しない

ということからこれら三つの散乱機構を含んだ移動度が解析的にかつ厳密に計算できることを示す。インターバレーフォノン散乱には Brunetti *et al.*³³⁾ がバルク Si のホットエレクトロンの解析より決定した三種類の f タイプと三種類の g タイプの散乱モードとその変形ポテンシャルを用いた。

導いた移動度の解析式を用いて計算した結果と、実験から得られた移動度の垂直電界依存性と温度依存性について比較検討した結果を述べる。まず低温においては、低電界ではイオン化不純物散乱のスクリーニング効果が効いており、高電界では表面粗さ散乱が寄与している。一方、高温では、音響フォノンとインターバレーフォノン散乱が主に効いているが、0.5 MV/cm 以上の高電界になってくると表面粗さ散乱が支配的となることが明らかになった。さらに、温度依存性では 100 K 以上の高温において観測される移動度が T^{-n} ($n > 1$) となるのは音響フォノンに加えてインターバレーフォノン散乱が寄与してくるためであることを明らかにした。

6 章では、5 章で導き出した移動度の解析式を用いて実効移動度の基板バイアス電圧と基板不純物濃度に関するユニバーサル性について定量的に論じる。逆方向の基板バイアス電圧の印可と基板不純物濃度を高くすることは、基板の表面電界を強くするという効果がある。解析の結果、同じ垂直電界のところでは基板バイアス電圧と基板不純物濃度に関係無く移動度が一定となるのは、電子の閉じ込めが強くなるために移動度が低下するのと電子の再分布による移動度の上昇が丁度打ち消しあうためであることが定量的に明らかになった。

7 章では全体をまとめて結論とする。

本章の参考文献

- 1) J. G. Ruch : IEEE Trans. Electron Devices **ED-19** (1972) 652.
- 2) D. Hisamoto, T. Toyobe and E. Takeda : *Ext. Abs. of the 19th Conf. on Sol. St. Dev. and Mat., Tokyo, Japan, (1990)* p39.
- 3) S. Odanaka, A. Hiroki, K. Ohe, K. Moriyama and H. Umimoto :
IEEE Trans. Computer-Aided Design **CAD-10** (1991) 619.
- 4) M. Fukuma and R. H. Uebbing : *Int. Electron Device Meet. Tech. Dig.*
(IEEE, New York, 1984) p621.
- 5) J. R. Schrieffer : Phys. Rev. **97** (1955) 641.
- 6) J. R. Schrieffer : *Semiconductor Surface Physics*,
(University of Pennsylvania Press, Philadelphia, Pa., 1957) p55.
- 7) A. B. Fowler, F. F. Fang, W. E. Howard and P. J. Stiles :
Phys. Rev. Letters **16** (1966) 901.
- 8) T. Ando : J. Phys. Soc. Japan **38** (1975) 989.
- 9) Y. Katayama and N. Kotera : *Proc. 2nd Int. Conf. on Solid State Devices, Tokyo, 1970*, Suppl. Jpn. J. Appl. Phys. **40** (1971) p.214.
- 10) G. Dorda : J. Appl. Phys. **42** (1971) 2053.
- 11) T. Sato, Y. Takeishi, H. Hara and Y. Okamoto : Phys. Rev. **B4** (1971) 1950.
- 12) H. Sakaki and T. Sugano : Jpn. J. Appl. Phys. **10** (1971) 1016.
- 13) F. Stern : Phys. Rev. **B5** (1972) 4891.
- 14) F. F. Fang and A. B. Fowler : Phys. Rev. **169** (1968) 619.
- 15) F. Stern and W. E. Howard : Phys. Rev. **163** (1967) 816.

- 16) S. Kawaji : J. Phys. Soc. Jpn. **27** (1969) 906.
- 17) H. Ezawa, S. Kawaji and K. Nakamura : Jpn. J. Appl. Phys. **13** (1974) 126.
- 18) P. J. Price : Ann. Phys. **133** (1981) 217.
- 19) D. K. Ferry : Surf. Sci. **57** (1976) 218.
- 20) B. K. Ridley : J. Phys. C **15** (1982) 5899.
- 21) A. Hartstein, T. H. Ning and A. B. Fowler : Surf. Sci. **58** (1976) 178.
- 22) Y. Matsumoto and Y. Uemura : *Proc. 6th Int. Vacuum Congress, and 2nd Int. Conf. on Solid Surfaces, Kyoto, 1974*, Jpn. J. Appl. Phys. **13**(1974) Suppl. 2, Pt. 2, p367.
- 23) T. Ando, A. B. Fowler and F. Stern : Rev. Mod. Phys. **54** (1982) 437.
- 24) D. L. Scharfetter and H. K. Gummel : IEEE Trans. Electron Devices **ED-16** (1969) 64.
- 25) K. Yamaguchi : IEEE Trans. Electron Devices **ED-30** (1983) 658.
- 26) K. K. Thornber : J. Appl. Phys. **51** (1980) 2127.
- 27) J. A. Cooper, Jr. and D. F. Nelson : J. Appl. Phys. **54** (1983) 1445.
- 28) S. A. Schwarz and S. E. Russek : IEEE Trans. Electron Devices **ED-30** (1983) 1634.
- 29) M. Shirahata and C. Hamaguchi : Jpn. J. Appl. Phys. **25** (1986) 1040.
- 30) S. Takagi, M. Iwase and A. Toriumi : *Int. Electron Device Meet. Tech. Dig.* (IEEE, New York, 1988) p398.
- 31) N. Kotera, Y. Katayama, I. Yoshida and F. Komatsubara : J. Vac. Sci. & Technol. **9** (1972) 754.

- 32) S. Takagi, M. Iwase and A. Toriumi : *Ext. Abs. of the 22th Conf. on Sol. St. Dev. and Mat., Tokyo, Japan, (1990)* p275.
- 33) R. Brunetti, C. Jacoboni, F. Nava, L. Reggiani, G. Bosman and J. J. Zijlstra : *J. Appl. Phys.* **52** (1981) 6713.

第 2 章 二次元電子ガス状態の自己無撞着解法

2-1 緒言

MOS 構造の表面反転層やヘテロ接合の界面付近ではポテンシャルによる井戸が形成される。P 型 Si 基板の MOSFET の場合、ゲート電極に強い正の電界をかけると半導体表面のポテンシャルが大きく曲げられ、強反転状態となると電子は狭いポテンシャルの井戸の中で閉じ込められる。このとき井戸の幅は数十から数百 Å 程度となり、電子の波動関数の広がりと同程度になるためサイズ効果により酸化膜と半導体界面に垂直な方向に量子化される。界面に平行な方向はポテンシャルの影響を受けないため、平行な方向については自由電子的な運動を行う。このような状態の電子を二次元電子ガス、2DEG (2 Dimensional Electron Gas)、と呼ぶ。

量子化された MOS 反転層における 2DEG の状態について、次の仮定のもとに解析を行う

(a) 有効質量近似が有効であるとして、周期ポテンシャルを無視し、誘電率はバルク Si のものを用いる。

(b) 電子の波動関数は半導体表面と内部の無限遠方で 0 とする。

(c) 半導体と酸化膜との界面に存在する局在準位等の影響は無視し、等価な電界で置き換えるものとする。

上記の仮定のもとで、Stern¹⁾により提案された Schrödinger 方程式と Poisson 方程式を自己無撞着に解く方法とその数値計算結果を述べる。また、三角ポテンシャル^{2,3)}や変分関数^{1,4)}を用いた近似解法とその計算結果も述べる。

2.2 有効質量方程式

有効質量近似が有効であると仮定して、ポテンシャルが z 方向にのみ依存する場合、電子のエネルギー E と波動関数 Ψ は有効質量方程式

$$[T + V(z)]\Psi = E\Psi, \quad (2.2.1)$$

の解である。ここで $V(z)$ はポテンシャル、 T は運動エネルギーオペレーターで次のように書ける。

$$T = \frac{1}{2} \sum_{ij} w_{ij} P_i P_j, \quad (2.2.2)$$

ここで $P_j = -i\hbar(\partial/\partial x_j)$ 、 w_{ij} は逆質量テンソルである。式 (2.2.1) のポテンシャルエネルギー $V(z)$ は z のみの関数であるから試行関数として次のものを考える

$$\Psi(x, y, z) = \xi(z)\exp(ik_1x + ik_2y). \quad (2.2.3)$$

式 (2.2.2) を式 (2.2.1) に代入し式 (2.2.3) を用いると ξ は次の式を満たさなければならない

$$\left[-\frac{1}{2}w_{33}\hbar^2 \frac{d^2}{dz^2} - i\hbar^2(w_{13}k_1 + w_{23}k_2) \frac{d}{dz} + V(z) \right] \xi(z) = E'\xi(z), \quad (2.2.4)$$

ここで

$$E' = E - \frac{1}{2}\hbar^2(w_{11}k_1^2 + 2w_{12}k_1k_2 + w_{22}k_2^2). \quad (2.2.5)$$

次に

$$\xi(z) = \zeta(z)\exp[-iz(w_{13}k_1 + w_{23}k_2)/w_{33}], \quad (2.2.6)$$

とおいて式 (2.2.4) に代入すると

$$\left[-\frac{1}{2}w_{33}\hbar^2 \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] \zeta(z) = E''\zeta(z), \quad (2.2.7)$$

ここで

$$E'' = E' + \frac{\hbar^2 (w_{13}k_1 + w_{23}k_2)^2}{2w_{33}}, \quad (2.2.8)$$

$m_3 = 1/w_{33}$ とおくと式 (2.2.7) は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_3} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] \zeta(z) = E'' \zeta(z), \quad (2.2.9)$$

また

$$E = E'' \frac{1}{2} \hbar^2 \left[\left(w_{11} - \frac{w_{13}^2}{w_{33}} \right) k_1^2 + 2 \left(w_{12} - \frac{w_{13}w_{23}}{w_{33}} \right) k_1 k_2 + \left(w_{22} - \frac{w_{23}^2}{w_{33}} \right) k_2^2 \right], \quad (2.2.10)$$

となる。結局、式 (2.2.1) の有効質量方程式は式 (2.2.9) のように z に関する一次元の Schrödinger 方程式となり $\zeta(z)$ 、 E'' は k_1 、 k_2 に依存しない。また、 $\xi(z)$ と $\zeta(z)$ は位相因子のみが異なるので $|\xi(z)|^2 = |\zeta(z)|^2$ となる。

2-3 有効質量と縮重度

k 空間での等エネルギー面が回転楕円体をしている場合、楕円体の 3 つの軸方向を k_x 、 k_y 、 k_z 軸とするような座標系での逆有効質量テンソルを w'_{ij} とすると

$$w'_{ij} = \begin{bmatrix} 1/m_\alpha & 0 & 0 \\ 0 & 1/m_\beta & 0 \\ 0 & 0 & 1/m_\gamma \end{bmatrix}, \quad (2.3.1)$$

となる。変換行列 $\|a\|$ を用いると他の座標系での逆有効質量テンソル w_{ij} は

$$w_{ij} = \sum_k a_{ik} a_{jk} w'_{kk}, \quad (2.3.2)$$

と表される。

今、ある方向を z 軸とし、 x 軸、 y 軸は z 軸と垂直な面内で任意にとることができる。すると、 x 軸、 y 軸をうまくとることによって w_{ij} は次のような形にすることが可能である

$$w_{ij} = \begin{bmatrix} w_{11} & 0 & 0 \\ 0 & w_{22} & w_{23} \\ 0 & w_{23} & w_{33} \end{bmatrix}, \quad (2.3.3)$$

有効質量テンソルは

$$m_{ij} = w_{ij}^{-1}, \quad (2.3.4)$$

なので

$$m_{ij} = \begin{bmatrix} 1/w_{11} & 0 & 0 \\ 0 & (w_{22} - w_{23}^2/w_{33})^{-1} & (w_{23} - w_{22}w_{33}/w_{23})^{-1} \\ 0 & (w_{23} - w_{22}w_{33}/w_{23})^{-1} & (w_{33} - w_{23}^2/w_{33})^{-1} \end{bmatrix}, \quad (2.3.5)$$

となる。このことから、このような座標系では xy 面に平行な方向の運動には m_{11} と m_{22} のみに関与することがわかる。このとき、 m_1 、 m_2 、 m_3 を

$$\begin{aligned} m_1 &= m_{11} = \frac{1}{w_{11}} \\ m_2 &= m_{22} = \left(w_{22} - \frac{w_{23}^2}{w_{33}} \right)^{-1} \\ m_3 &= m_{33} = \left(w_{33} - \frac{w_{23}^2}{w_{33}} \right)^{-1}, \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

と定義する。

また、式 (2.3.3) で x 軸、 y 軸を 90 度回転させた座標系をとった場合、逆有効質量テンソルは

$$w_{ij} = \begin{bmatrix} w_{11} & 0 & w_{13} \\ 0 & w_{22} & 0 \\ w_{13} & 0 & w_{33} \end{bmatrix}, \quad (2.3.7)$$

となるので

$$m_{ij} = \begin{bmatrix} (w_{11} - w_{13}^2/w_{33})^{-1} & 0 & (w_{13} - w_{11}w_{33}/w_{13})^{-1} \\ 0 & 1/w_{22} & 0 \\ (w_{13} - w_{11}w_{33}/w_{13})^{-1} & 0 & (w_{33} - w_{13}^2/w_{11})^{-1} \end{bmatrix}, \quad (2.3.8)$$

となる。式 (2.3.6) と同様に m_1 、 m_2 、 m_3 を

$$m_1 = m_{11} = \left(w_{11} - \frac{w_{13}^2}{w_{33}} \right)^{-1}$$

$$m_2 = m_{22} = 1/w_{22}$$

$$m_3 = m_{33} = \left(w_{33} - \frac{w_{13}^2}{w_{11}} \right)^{-1}, \quad (2.3.9)$$

と定義する。

Si の伝導帯はブリルアンゾーンの X 点の近くに位置した六個のバレーからできていて、その等エネルギー面は、 m_0 を電子の静止質量とすると短軸方向の有効質量が $m_t = 0.19m_0$ で、長軸方向の有効質量が $m_l = 0.916m_0$ の回転楕円体をしている。図 2.1 に Si のバレーの様子を示す。図 2.2 に各結晶面方向におけるバレーの様子を示す。

例として、Si で z 軸を (110) 面と垂直な方向にとった場合を考える。変換行列を

$$a_{ij} = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.3.10)$$

とする。

回転楕円体の長軸方向の有効質量を m_l 、短軸方向の有効質量を m_t として、図 2.1 のバレー 1、2 に対して逆有効質量テンソルは

$$w'_{ij} = \begin{bmatrix} 1/m_l & 0 & 0 \\ 0 & 1/m_t & 0 \\ 0 & 0 & 1/m_t \end{bmatrix}, \quad (2.3.11)$$

であるから、式 (2.3.2) より

$$w_{ij} = \sum_k a_{ik} a_{jk} w'_{kk} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_l} + \frac{1}{m_t} \right) & 0 & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_l} - \frac{1}{m_t} \right) \\ 0 & \frac{1}{m_t} & 0 \\ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_l} - \frac{1}{m_t} \right) & 0 & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_l} + \frac{1}{m_t} \right) \end{bmatrix}, \quad (2.3.12)$$

となるので、 m_1 と m_2 は式 (2.3.9) より、 m_3 は式 (2.2.7) と (2.2.9) の定義より

$$m_1 = \frac{m_t + m_l}{2}$$

$$m_2 = m_t$$

$$m_3 = \frac{2m_t m_l}{m_t + m_l}, \quad (2.3.13)$$

となる。バレー 3、4 に対しても同じとなる。

次にバレー 5、6 に対しては

$$w'_{ij} = \begin{bmatrix} 1/m_t & 0 & 0 \\ 0 & 1/m_t & 0 \\ 0 & 0 & 1/m_l \end{bmatrix}, \quad (2.3.14)$$

であるから

$$w_{ij} = \begin{bmatrix} 1/m_t & 0 & 0 \\ 0 & 1/m_l & 0 \\ 0 & 0 & 1/m_t \end{bmatrix}, \quad (2.3.15)$$

となり、 m_1 と m_2 は式 (2.3.9) より、 m_3 は式 (2.2.7) と (2.2.9) の定義より有効質量テンソルは

$$\begin{aligned} m_1 &= m_t \\ m_2 &= m_l \\ m_3 &= m_t, \end{aligned} \quad (2.3.16)$$

となる。Si の他の結晶面方向における m_1 、 m_2 、 m_3 は同様の計算を行って求めることができ、各結晶面方向における有効質量と縮重度 n_v は表 2.1⁴⁾ のようになる。

表 2.1 Si の各面方位における有効質量と縮重度⁴⁾。

面	m_1	m_2	m_3	n_v
{100}	m_t	m_t	m_l	2
	m_t	m_l	m_t	4
{110}	m_t	$(m_t + m_l)/2$	$2m_l m_t / (m_t + m_l)$	4
	m_t	m_l	m_t	2
{111}	m_t	$(m_t + 2m_l)/3$	$3m_l m_t / (m_t + 2m_l)$	6

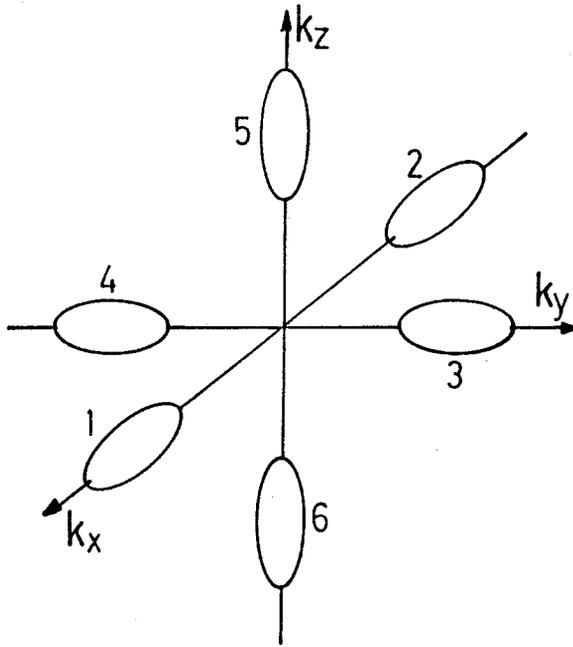


図 2.1 Si 伝導帯のバレー構造。

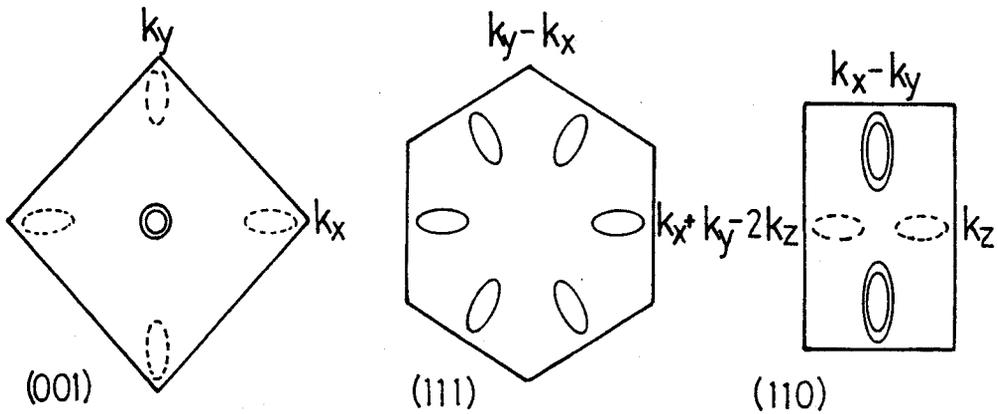


図 2.2 Si の各結晶面方位におけるバレー構造⁴⁾。

2-4 二次元電子ガス状態の自己無撞着な解法

Si 反転層において界面に垂直な方向を z 軸、界面に平行な方向を x 軸 y 軸とすると、2-2 有効質量方程式の節で述べたように i 番目のサブバンドにおける二次元電子ガスの波動関数 Ψ_i は有効質量近似のもとで電子の包絡関数 $\zeta_i(z)$ により次式で与えられる。

$$\Psi_i(x, y, z) = \zeta_i(z) \exp(i\theta z) \exp(ik_x x + ik_y y), \quad (2.4.1)$$

ただし、 k_x, k_y はバンドエッジから測った値で、 x 軸 y 軸を回転すると式 (2.2.3) における k_1 と k_2 はそれぞれ k_x と k_y とおくことができる。 θ は k_x, k_y に依存しない。 $\exp(i\theta z)$ は位相因子のみの値であるので省略すると、二次元電子ガスの波動関数 Ψ_i は次のように表される

$$\Psi_i(\vec{r}_{\parallel}, z) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\vec{k}_{\parallel} \vec{r}_{\parallel}} \zeta_i(z), \quad (2.4.2)$$

ここで、 A は規格化面積で、 \vec{k}_{\parallel} と \vec{r}_{\parallel} は界面に平行な二次元電子ガスの波数ベクトルと位置ベクトルである。 $\zeta_i(z)$ は z 方向の長さ L で規格化されているので

$$\int |\zeta_i(z)|^2 dz = 1, \quad (2.4.3)$$

となる。電子の固有値 E_i と包絡関数 $\zeta_i(z)$ は一次元の Schrödinger 方程式を解くことにより得られる。

$$-\frac{\hbar^2}{2m_3} \frac{d^2}{dz^2} \zeta_i(z) - e\phi(z) \zeta_i(z) = E_i \zeta_i(z), \quad (2.4.4)$$

ここで、 $-e\phi(z)$ はポテンシャルエネルギー（または伝導帯の底のエネルギーととることができる）で、 m_3 は z 方向の有効質量であり、 $\zeta_i(z)$ の境界条件は $\zeta_i(0) = 0$ と $\zeta_i(\infty) = 0$ とする。電子の固有値 E_i はサブバンドエネルギーの底を意味し、放物線近似の範囲で電子のエネルギーは次式で与えられる

$$E_i(\vec{k}_{\parallel}) = E_i + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_2}, \quad (2.4.5)$$

ここで、 m_1 、 m_2 はそれぞれ x 軸 y 軸方向の有効状態密度質量である。ポテンシャル $\phi(z)$ は Poisson 方程式の解として求められる。

$$\frac{d^2\phi}{dz^2} = -\frac{1}{\kappa_{Si}\epsilon_0} \left[\rho_{\text{depl}}(z) - e \sum N_i |\zeta_i(z)|^2 \right], \quad (2.4.6)$$

ここで、 κ_{Si} は Si の比誘電率、 ϵ_0 は真空中の誘電率、 $\rho_{\text{depl}}(z)$ は空間電荷面密度で、空乏層幅 z_d までアクセプタがイオン化しているとして

$$\begin{aligned} \rho_{\text{depl}}(z) &= -e(N_A - N_D) & (0 \leq z < z_d) \\ &= 0 & (z_d \leq z), \end{aligned} \quad (2.4.7)$$

$$z_d = \left[\frac{2\kappa_{Si}\epsilon_0\phi_d}{e(N_A - N_D)} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (2.4.8)$$

で与えられ、 $N_A - N_D$ は正味のアクセプタ密度、 ϕ_d はバルクと表面との電位差である。

電子が二次元的な運動をすると、状態密度も三次元の場合と異なる。電子のエネルギーが式 (2.4.5) で表されるとき

$$\begin{aligned} k'_x &= (m^*/m_1)^{\frac{1}{2}} k_x \\ k'_y &= (m^*/m_2)^{\frac{1}{2}} k_y \\ k'_{\parallel}{}^2 &= (k'_x{}^2 + k'_y{}^2), \end{aligned} \quad (2.4.9)$$

とおくと

$$E = E_i + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k'_x{}^2 + k'_y{}^2) = E_i + \frac{\hbar^2}{2m^*} k'_{\parallel}{}^2, \quad (2.4.10)$$

となる、ここで m^* は xy 面内で等方的な有効質量で、 k'_{\parallel} は xy 面内の電子の波数とする。

状態密度 $D_i(E)dE$ はスピン因子 2 を含めると

$$\begin{aligned} D_i(E)dE &= \frac{2}{(2\pi)^2} dk_x dk_y = \frac{2}{(2\pi)^2} \frac{\sqrt{m_1 m_2}}{m^*} dk'_x dk'_y \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{\sqrt{m_1 m_2}}{m^*} k'_{\parallel} dk'_{\parallel}, \end{aligned} \quad (2.4.11)$$

となり、式 (2.4.10) より k_{\parallel}^{\prime} を E で表すと

$$D_i(E)dE = \frac{1}{\pi\hbar^2}\sqrt{m_1m_2}dE, \quad (2.4.12)$$

となる。有効状態密度質量 m_{di} を

$$m_{di} = \sqrt{m_1m_2}, \quad (2.4.13)$$

と定義すると

$$D_i(E)dE = \frac{1}{\pi\hbar^2}m_{di}dE, \quad (2.4.14)$$

となる。Si のようにバレーが複数個存在する場合、 i 番目のサブバンドにおける単位面積当たりの二次元の状態密度関数 $D_i(E)$ はスピンの因子 2 とバレーの縮重度 n_{vi} を考慮して

$$D_i(E) = \frac{n_{vi}m_{di}}{\pi\hbar^2}u(E - E_i), \quad (2.4.15)$$

で表され、ここで $u(E)$ は単位階段関数 ($E \geq 0$ で $u(E) = 1$ 、 $E < 0$ で $u(E) = 0$) である。

サブバンド i における電子密度 N_i は二次元の状態密度と電子の分布関数の積をエネルギーで積分すれば得られるから

$$\begin{aligned} N_i &= \int_0^{\infty} D_i(E)f(E)dE \\ &= \frac{m_{di}n_{vi}}{\pi\hbar^2} \int_0^{\infty} \frac{u(E - E_i)}{1 + \exp[(E - E_F)/k_B T]} dE \\ &= \frac{m_{di}n_{vi}k_B T}{\pi\hbar^2} \ln \left\{ 1 + \exp[(E_F - E_i)/k_B T] \right\}, \end{aligned} \quad (2.4.16)$$

となる。ここで、 E_F はフェルミエネルギーである。

サブバンド i における電子の半導体表面からの平均距離 z_i は

$$z_i = \frac{\int z\zeta_i^2(z)dz}{\int \zeta_i^2(z)dz}, \quad (2.4.17)$$

で表され、反転層内における総電子の半導体表面からの平均距離 z_{av} は

$$z_{av} = \sum_i z_i N_i / N_{inv}, \quad (2.4.18)$$

となる、ここで、 N_{inv} は反転層の総電子数である。

二次元量子化された Si 反転層内における電子の状態は Stern¹⁾ により提案されたように、Schrödinger 方程式と Poisson 方程式を連立させて数値計算によって自己無撞着に解くことにより得られる。また、単一ヘテロ構造の 2DEG に対する自己無撞着的な解法は Ando^{5,6)} や Hihara *et al.*^{7,8)} により与えられ、 $Al_x Ga_{1-x} As/GaAs$ や $AlGaAs/GaAs/AlGaAs$ のヘテロ構造素子の解析に用いられている。実際に計算で求めるフローチャートを図 2.3 に示す。

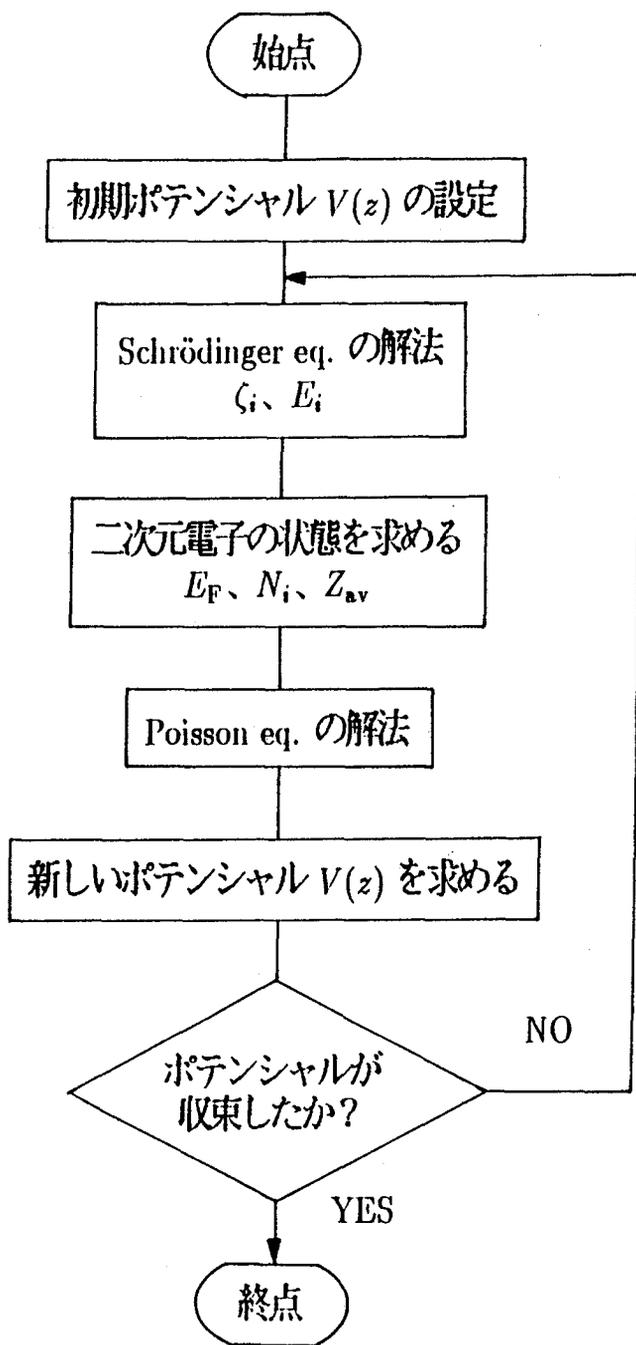


図 2.3 Schrödinger 方程式と Poisson 方程式の自己無撞着的な解法のフローチャート図。

2-5 近似的解法

一般的に二次元電子ガス状態は Schrödinger 方程式と Poisson 方程式を連立させて自己無撞着に解く必要があるが、ここでは三角ポテンシャル近似と変分関数を用いた近似的解放について述べる。

2-5-1 三角ポテンシャル近似

表面反転電子密度が少ない場合、表面反転層のポテンシャルを次式で近似する。

$$\begin{aligned}\phi &= -F_s z & (z > 0) \\ &= \infty & (z < 0),\end{aligned}\tag{2.5.1}$$

ここで、 F_s は半導体表面の電界である。このとき、Schrödinger 方程式 (2.4.4) は

$$\frac{d^2 \zeta_i}{dz^2} + \frac{2m_3}{\hbar^2} [E_i - eF_s z] \zeta_i = 0,\tag{2.5.2}$$

となり、上式を

$$x \equiv \left(\frac{2m_3 e F_s}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left(z - \frac{E_i}{eF_s} \right),\tag{2.5.3}$$

で置換すれば

$$\frac{d^2 \zeta_i}{dx^2} - x \zeta_i = 0,\tag{2.5.4}$$

上式の解は Airy 関数で与えられるから⁹⁾、三角ポテンシャルで近似した場合の波動関数は

$\zeta_i(0) = 0$ の境界条件について

$$\zeta_i(z) = \text{Ai} \left[\left(\frac{2m_3 e F_s}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left(z - \frac{E_i}{eF_s} \right) \right],\tag{2.5.5}$$

エネルギー固有値は

$$E_i \simeq \left(\frac{\hbar^2}{2m_3} \right)^{\frac{1}{3}} \left[\frac{3}{2} \pi e F_s \left(i + \frac{3}{4} \right) \right]^{\frac{2}{3}},\tag{2.5.6}$$

ここで、 $i+3/4$ に相当する値は厳密では 0.7587、1.7540、2.7525 となっており、この近似でもかなりよいことが示される。各サブバンドにおける電子の平均距離は

$$\begin{aligned} z_i &= \int z \zeta_i^2(z) dz / \int \zeta_i^2(z) dz \\ &= \frac{2E_i}{3eF_s}, \end{aligned} \quad (2.5.7)$$

である。

2-5-2 変分法による解

サブバンドの最下位レベルにだけ電子が存在する場合を、電氣的量子極限と呼ぶが、この状態では変分法による解がよい近似となる。

試行関数として次式を用いると^{1,4)}

$$\zeta_0(z) = \left(\frac{1}{2}b^3\right)^{\frac{1}{2}} z \exp\left(-\frac{bz}{2}\right), \quad (2.5.8)$$

ただし、 b は未定定数で、変分法により決定できる。

このとき、サブバンドの最下位レベルの値は

$$E_0 = \frac{\hbar^2 b^2}{8m_3} + \left(\frac{3e^2}{\kappa_{\text{Si}} \epsilon_0 b}\right) \left[N_{\text{depl}} + \frac{11}{16} N_{\text{inv}} - \frac{2}{b} (N_A - N_D) \right], \quad (2.5.9)$$

上式から求められる変分法の結果は

$$\begin{aligned} b &= b_0 + \delta b, \\ b_0 &= \left(\frac{12m_3 e^2 N^*}{\kappa_{\text{Si}} \epsilon_0 \hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}, \\ \delta b &= -\frac{4N_A}{3N^*}, \end{aligned} \quad (2.5.10)$$

$$z_0 = z_{00} + \delta z_0,$$

$$z_{00} = \left(\frac{9\kappa_{\text{Si}}\epsilon_0\hbar^2}{4m_3e^2N^*} \right)^{\frac{1}{3}},$$

$$\delta z_0 = \frac{4N_A z_{00}^2}{9N^*}, \quad (2.5.11)$$

$$E_0 = E_{00} + \delta E_0,$$

$$E_{00} = \left(\frac{3}{2} \right)^{\frac{5}{3}} \left(\frac{e^2\hbar}{\sqrt{m_3}\kappa_{\text{Si}}\epsilon_0} \right)^{\frac{2}{3}} \left(N_{\text{depl}} + \frac{55}{96}N_{\text{inv}} \right) \left(\frac{1}{N^*} \right)^{\frac{1}{3}},$$

$$\delta E_0 = - \left(\frac{2N_A e^2 z_{00}^2}{3\kappa_{\text{Si}}\epsilon_0 N^*} \right) \left(N_{\text{depl}} + \frac{11}{96}N_{\text{inv}} \right), \quad (2.5.12)$$

ただし、 $N^* = N_{\text{depl}} + (11/32) N_{\text{inv}}$ で、 N_A は正味のアクセプタ密度である。

電氣的量子極限において、最下位レベルより上のエネルギーレベルについても、ポテンシャル $\phi(z)$ を摂動として取り扱うことにより求めることができる。反転電荷を表面から z_0 だけ離れたところに位置する膜とみなし、Airy 関数の振動を無視し励起状態の確率密度が $1/\sqrt{(a_i - z)}$ に比例するものとする。ここに、 $a_i = E_{i,d}/eF_{\text{depl}}$ 、 $F_{\text{depl}} = eN_{\text{depl}}/\kappa_{\text{Si}}\epsilon_0$ である。励起エネルギーレベルは近似的に

$$E_i = E_{i,d} - \frac{e^2 F_{\text{depl}} F_{\text{inv}} z_0^2}{4E_{i,d}} - \frac{4E_{i,d}^2}{15eF_{\text{depl}} z_d} + eF_{\text{inv}} z_0, \quad (2.5.13)$$

で与えられる。ただし、 $F_{\text{inv}} = eN_{\text{inv}}/\kappa_{\text{Si}}\epsilon_0$ 、 $E_{i,d}$ は表面における電界を F_{depl} として式 (2.5.6) から求める。第二項は反転電荷のポテンシャルによるエネルギーの変化分、第三項は空乏層の電荷による影響、第四項は表面において反転電荷がエネルギーレベルに与える影響を表す。

2-6 自己無撞着解法による計算結果と検討

バルク Si の等エネルギー面は図 2.1 に示すように六個の回転楕円体をしており、(100) Si 表面反転層内においては界面に垂直な方向 (z 軸) の有効質量 m_3 の値に応じて、二種類のサブバンドが形成される。 $m_3 = 0.916m_0$ の二個のバレーからできるサブバンドを $0, 1, 2, 3, \dots$ とし、 $m_3 = 0.19m_0$ の四角のバレーからできるサブバンドを $0', 1', 2', 3', \dots$ とする。これは Stern¹⁾ が用いた表記法であり、本論文でもその表記法にならった。

Schrödinger 方程式と Poisson 方程式を自己無撞着的に解いた電子のポテンシャル $V(z)$ と波動関数の自乗 $|\zeta_i|^2$ を図 2.4 ($T=300$ K)、図 2.5 ($T=77$ K)、図 2.6 ($T=4.2$ K) に示す。反転電子密度 $N_{inv} = 1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ 、アクセプタ密度 $N_A = 1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ は同じで温度がそれぞれ $T = 300$ 、 77 、 4.2 K と変えている。温度が低くなるとポテンシャルが低くなるために電子の波動関数が広がる傾向が見られる。図 2.7 にサブバンドエネルギー E_i 、図 2.8 に電子の占有率 N_i 、図 2.9 に表面からの電子の平均距離 z_i の温度依存性を示す。図 2.7 より 50 K まではサブバンドエネルギーとフェルミエネルギーには変化は無く、50 K 以上ではサブバンド間エネルギー差が大きくなりフェルミエネルギーは低くなる。図 2.8 より 20 K より高くなると、電子は励起エネルギー準位にも占有するようになる。図 2.9 より基底準位の電子の平均距離はあまり変わらないが、励起エネルギー準位は 20 K より高くなると電子が表面に引き寄せられる様子が分かる。

図 2.10 には温度 $T = 300$ K、アクセプタ密度 $N_A = 1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ 、反転電子密度 $N_{inv} = 5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ としたときのポテンシャルと波動関数の自乗を示す。図 2.4 に比べてポテンシャルが高くなり電子がより表面に閉じ込められている様子が分かる。温度 $T = 300$ K、アクセプタ密度 $N_A = 1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ を一定として、図 2.11 にサブバンドエネルギー E_i 、図 2.12 に電子の占有率 N_i 、図 2.13 に表面からの電子の平均距離 z_i の反転電子密度

依存性を示す。これらの図より反転電子密度が増加するにつれて電子の閉じ込めが強くなり、サブバンド間のエネルギー差が大きくなり、高いエネルギーのサブバンドから低いエネルギーのサブバンドへ電子の再分布が起こる。また、ここで注意したいのは、反転電子密度が増加するとフェルミエネルギーがサブバンド E_0 に近づき交差していることである。これは室温においても反転電子密度が高くなると電子の縮退の効果がでてくることを意味している。

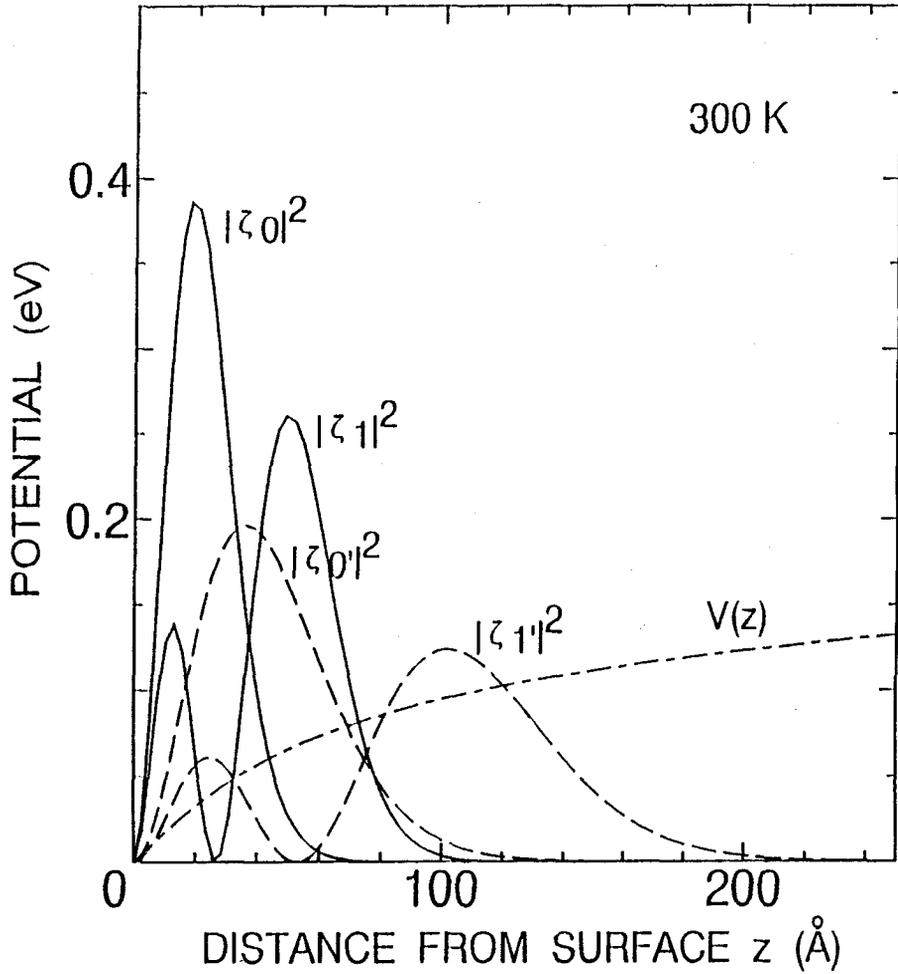


図 2.4 温度 $T=300\text{ K}$ 、反転電子密度 $N_{\text{inv}} = 1 \times 10^{12}\text{ cm}^{-2}$ 、アクセプタ密度 $N_{\text{A}} = 1 \times 10^{15}\text{ cm}^{-3}$ で、(100) Si 反転層内における自己無撞着的に解いた電子のポテンシャル $V(z)$ と波動関数の自乗 $|\zeta_i|^2$ 。

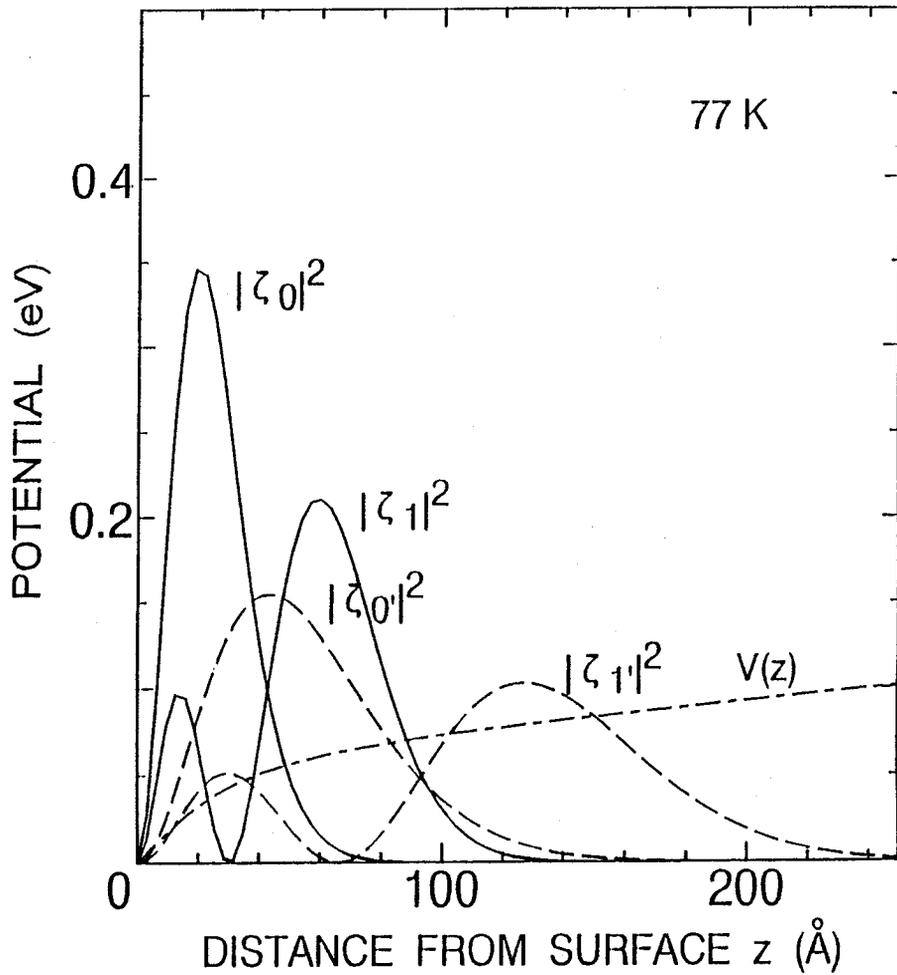


図 2.5 温度 $T=77\text{ K}$ 、反転電子密度 $N_{\text{inv}} = 1 \times 10^{12}\text{ cm}^{-2}$ 、アクセプタ密度 $N_{\text{A}} = 1 \times 10^{15}\text{ cm}^{-3}$ で、(100) Si 反転層内における自己無撞着的に解いた電子のポテンシャル $V(z)$ と波動関数の自乗 $|\zeta_i|^2$ 。

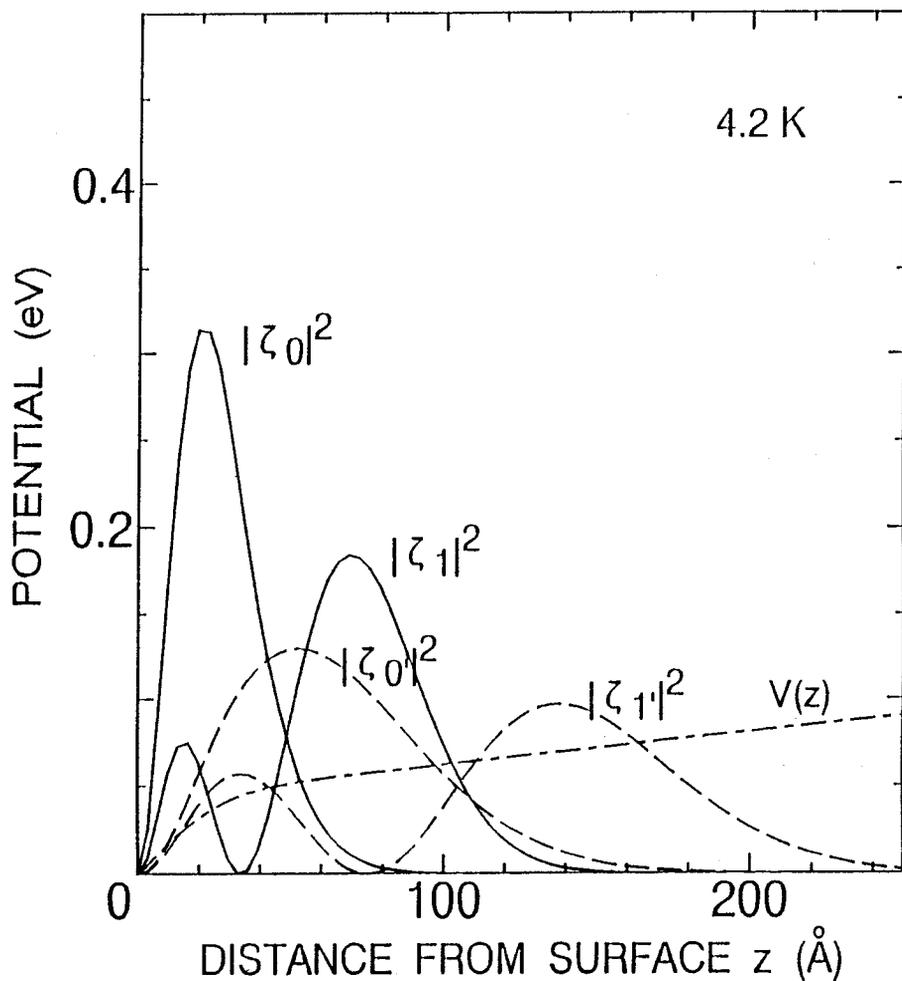


図 2.6 温度 $T=4.2$ K、反転電子密度 $N_{inv} = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 、アクセプタ密度 $N_A = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ で、(100) Si 反転層内における自己無撞着的に解いた電子のポテンシャル $V(z)$ と波動関数の自乗 $|\zeta_i|^2$ 。

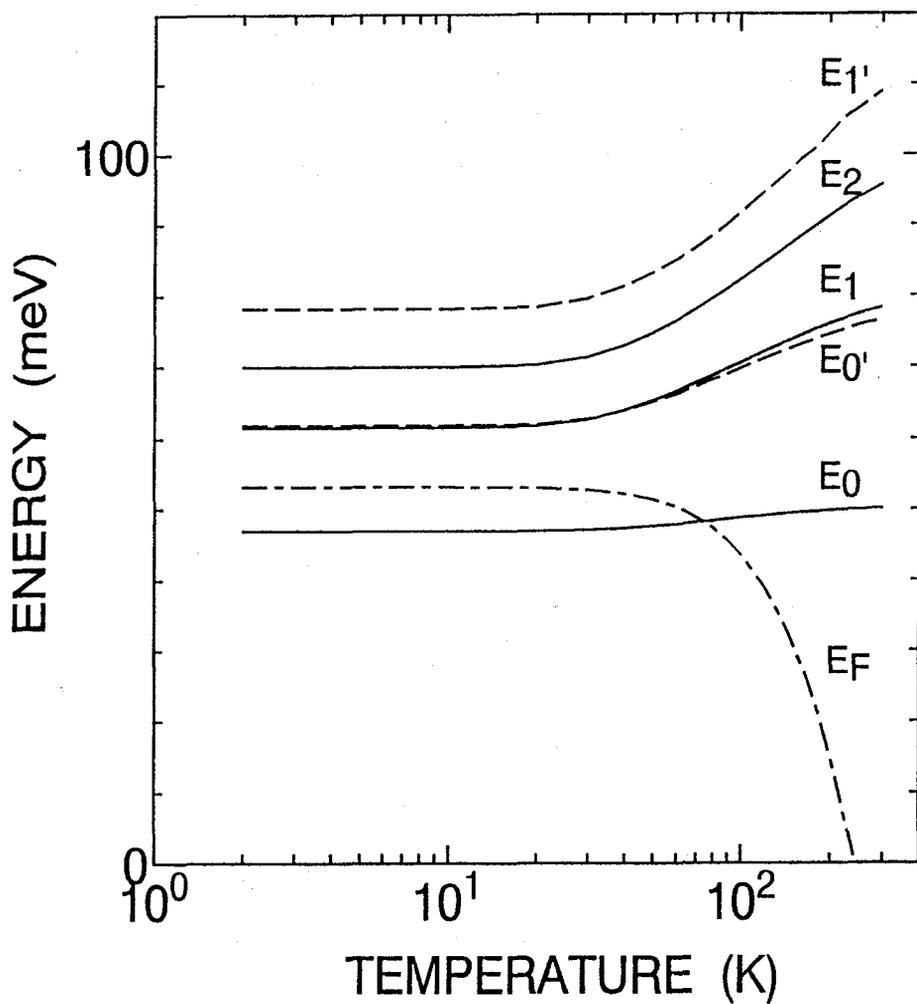


図 2.7 反転電子密度 $N_{inv} = 1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ 、アクセプタ密度 $N_A = 1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ で、(100) Si 反転層内におけるサブバンドエネルギー E_i とフェルミエネルギー E_F の温度依存性。

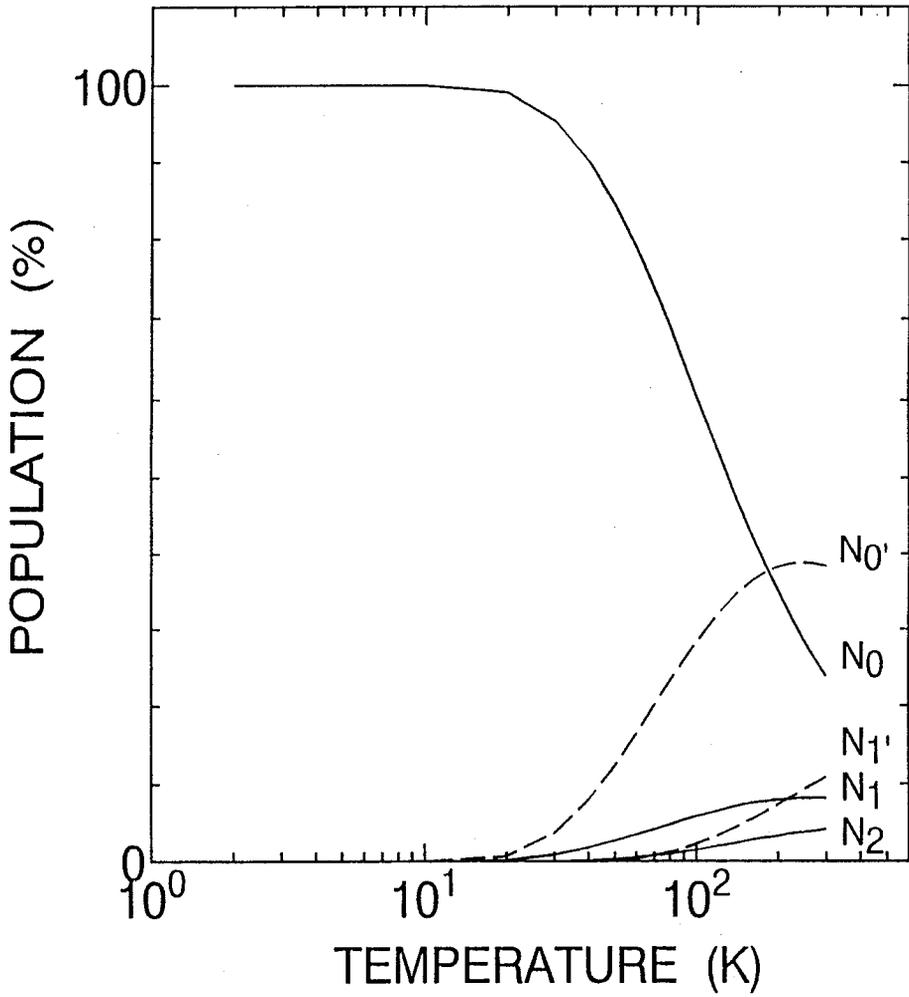


図 2.8 反転電子密度 $N_{inv} = 1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ 、アクセプタ密度 $N_A = 1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ で、(100) Si 反転層内における電子占有率 N_i の温度依存性。

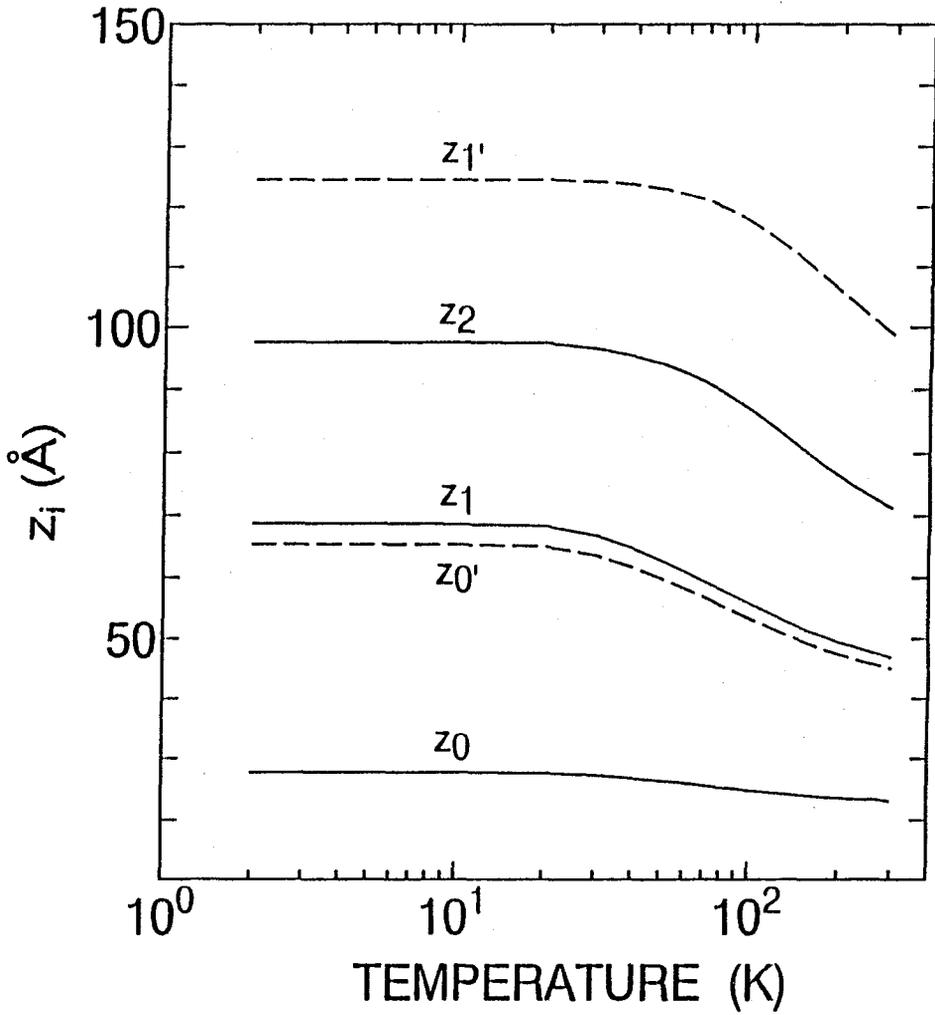


図 2.9 反転電子密度 $N_{\text{inv}} = 1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ 、アクセプタ密度 $N_A = 1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ で、(100) Si 反転層内における表面からの電子の平均距離 z_i の温度依存性。

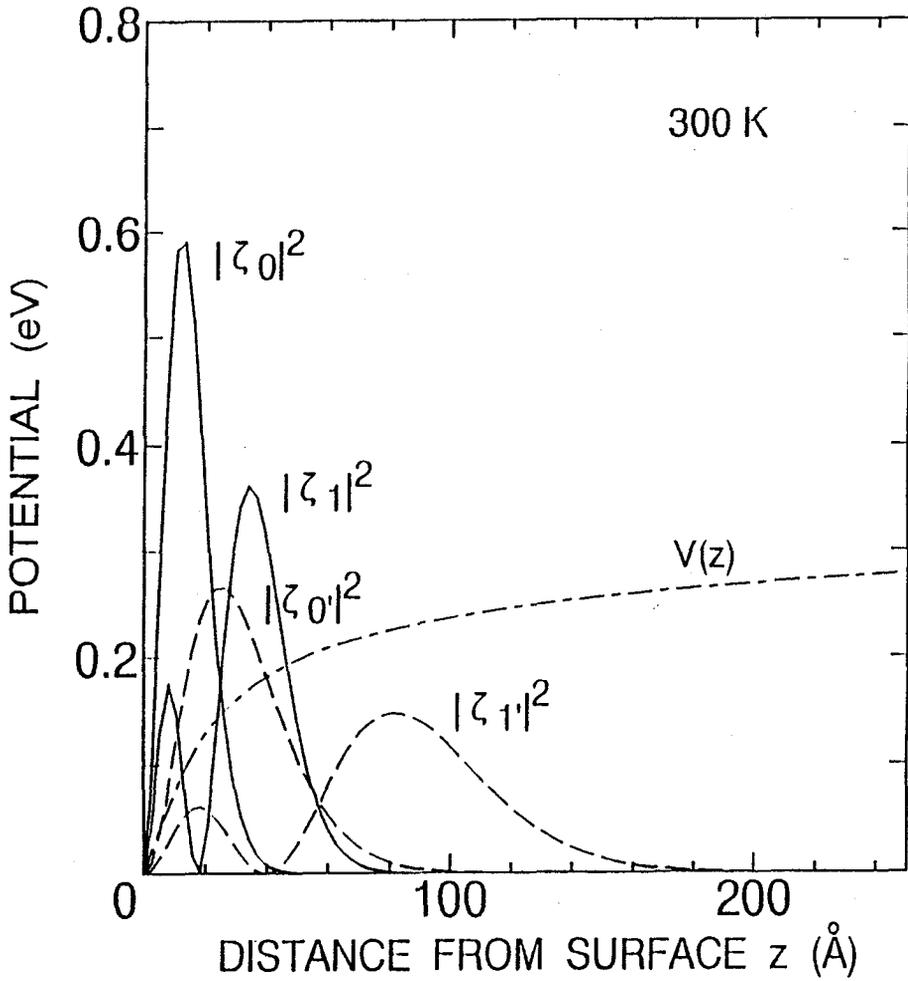


図 2.10 温度 $T = 300$ K、反転電子密度 $N_{\text{inv}} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 、アクセプタ密度 $N_A = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ で、(100) Si 反転層内における自己無撞着的に解いた電子のポテンシャル $V(z)$ と波動関数の自乗 $|\zeta_i|^2$ 。

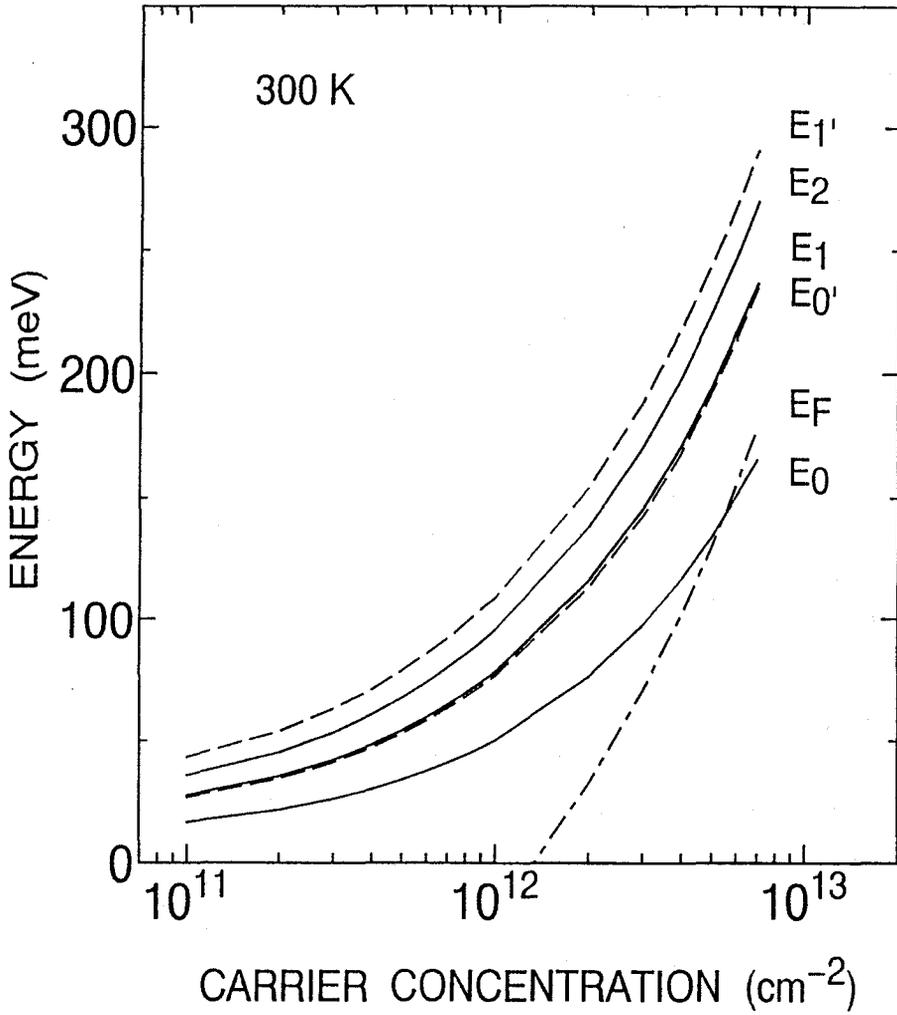


図 2.11 温度 $T = 300 \text{ K}$ 、アクセプタ密度 $N_A = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ で、(100) Si 反転層内におけるサブバンドエネルギー E_i とフェルミエネルギー E_F の反転電子密度依存性。

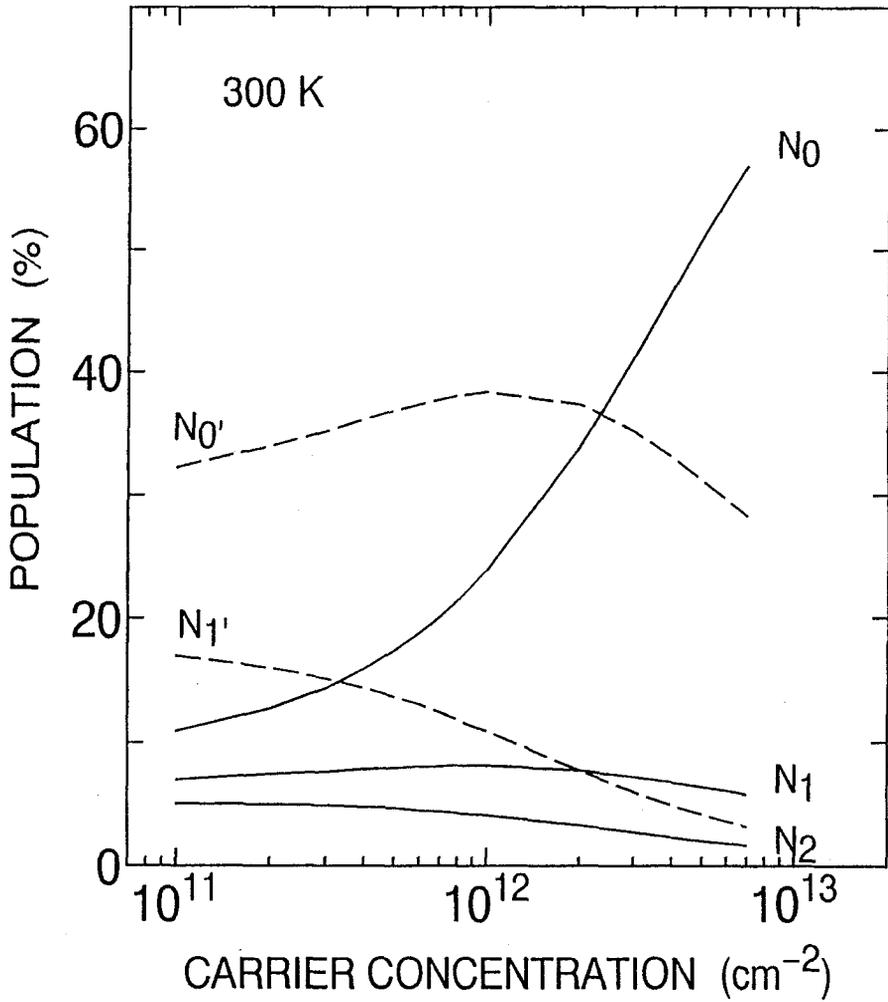


図 2.12 温度 $T = 300 \text{ K}$ 、アクセプタ密度 $N_A = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ で、(100) Si 反転層内における電子占有率 N_i の反転電子密度依存性。

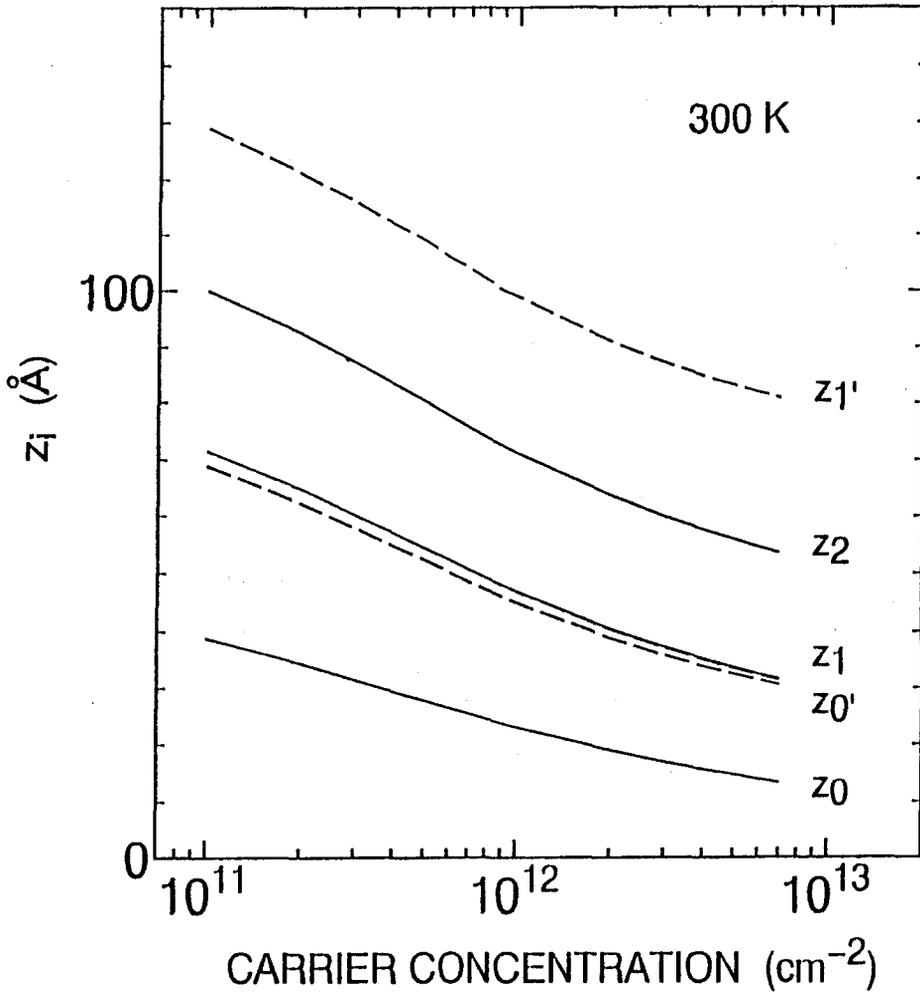


図 2.13 温度 $T = 300 \text{ K}$ 、アクセプタ密度 $N_A = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ で、(100) Si 反転層内における表面からの電子の平均距離 z_j の反転電子密度依存性。

計算条件は同じとし、温度 $T = 300 \text{ K}$ 、反転電子密度 $N_{\text{inv}} = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 、アクセプタ密度 $N_A = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ でサブバンドエネルギー E_i 、電子の占有率 N_i 、表面からの電子の平均距離 z_i を、自己無撞着的な解法により求めた結果を表 2.2 に、変分法による近似解を表 2.3 に、三角ポテンシャルによる近似解を表 2.4 に示す。上記の 2-5-2 の節で述べたように変分法は基底準位にのみ電子が存在すると仮定し、電子の波動関数として試行関数を用いて、まず基底準位のサブバンドエネルギー E_0 と電子の表面からの平均距離 z_0 を求めてから、励起準位の電子状態を求めている。その結果は自己無撞着的に求めた値よりサブバンドエネルギーの値が小さく、電子の表面からの平均距離が大きく、基底準位の電子の占有率が少なくなっている。これは、図 2.14 に示すように変分法により求めた電子のポテンシャルが図 2.4 の自己無撞着的解法より求めたポテンシャルの値より小さいためであり、波動関数の自乗の値が、変分法により決定したものの方が広がっていることによる。三角ポテンシャル近似の場合は自己無撞着的な解法に比べてポテンシャルが急峻になるため、サブバンドエネルギーの値は大きくなり、電子の表面からの距離が小さくなり、電子の占有率は低いエネルギー準位に多くなっている。

表 2.2 自己無撞着的解法による (100) Si 反転層における電子状態。 $T = 300 \text{ K}$ 、 $N_{\text{inv}} = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 、 $N_A = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 。

サブバンドの エネルギー (meV)	表面からの電子の 平均距離 (Å)	電子の占有率 (%)
$E_0 = 50.1$	$Z_0 = 23.2$	$N_0 = 23.9$
$E_1 = 78.3$	$Z_1 = 47.0$	$N_1 = 8.2$
$E_2 = 95.7$	$Z_2 = 71.3$	$N_2 = 4.2$
$E_3 = 108.1$	$Z_3 = 95.9$	$N_3 = 2.6$
$E_4 = 117.6$	$Z_4 = 121.0$	$N_4 = 1.8$
$E_5 = 125.3$	$Z_5 = 146.2$	$N_5 = 1.3$
$E_{0'} = 76.6$	$Z_{0'} = 45.1$	$N_{0'} = 38.4$
$E_{1'} = 109.3$	$Z_{1'} = 98.9$	$N_{1'} = 10.9$
$E_{2'} = 127.5$	$Z_{2'} = 154.3$	$N_{2'} = 5.4$
$E_{3'} = 140.2$	$Z_{3'} = 206.8$	$N_{3'} = 3.3$

表 2.3 変分法による (100) Si 反転層における電子状態。 $T = 300$ K、 $N_{inv} = 1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ 、 $N_A = 1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ 。

サブバンドの エネルギー (meV)	表面からの電子の 平均距離 (\AA)	電子の占有率 (%)
$E_0 = 46.9$	$Z_0 = 30.2$	$N_0 = 12.1$
$E_1 = 62.3$	$Z_1 = 82.2$	$N_1 = 6.7$
$E_2 = 69.6$	$Z_2 = 111.1$	$N_2 = 5.1$
$E_3 = 75.7$	$Z_3 = 136.6$	$N_3 = 4.0$
$E_4 = 81.2$	$Z_4 = 159.9$	$N_4 = 3.2$
$E_5 = 86.2$	$Z_5 = 181.7$	$N_5 = 2.7$
$E_{0'} = 61.5$	$Z_{0'} = 78.9$	$N_{0'} = 30.3$
$E_{1'} = 76.2$	$Z_{1'} = 138.9$	$N_{1'} = 17.2$
$E_{2'} = 87.6$	$Z_{2'} = 187.7$	$N_{2'} = 11.1$
$E_{3'} = 97.4$	$Z_{3'} = 230.8$	$N_{3'} = 7.6$

表 2.4 三角ポテンシャル近似による (100) Si 反転層における電子状態。 $T = 300$ K、 $N_{inv} = 1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ 、 $N_A = 1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ 。

サブバンドの エネルギー (meV)	表面からの電子の 平均距離 (\AA)	電子の占有率 (%)
$E_0 = 53.1$	$Z_0 = 20.9$	$N_0 = 39.9$
$E_1 = 93.4$	$Z_1 = 36.7$	$N_1 = 8.7$
$E_2 = 126.3$	$Z_2 = 49.6$	$N_2 = 2.5$
$E_3 = 155.3$	$Z_3 = 61.0$	$N_3 = 0.8$
$E_4 = 181.8$	$Z_4 = 71.4$	$N_4 = 0.3$
$E_5 = 206.5$	$Z_5 = 81.1$	$N_5 = 0.1$
$E_{0'} = 89.7$	$Z_{0'} = 35.2$	$N_{0'} = 44.1$
$E_{1'} = 157.8$	$Z_{1'} = 62.0$	$N_{1'} = 3.2$
$E_{2'} = 213.3$	$Z_{2'} = 83.8$	$N_{2'} = 0.4$
$E_{3'} = 262.3$	$Z_{3'} = 103.0$	$N_{3'} = 0.1$

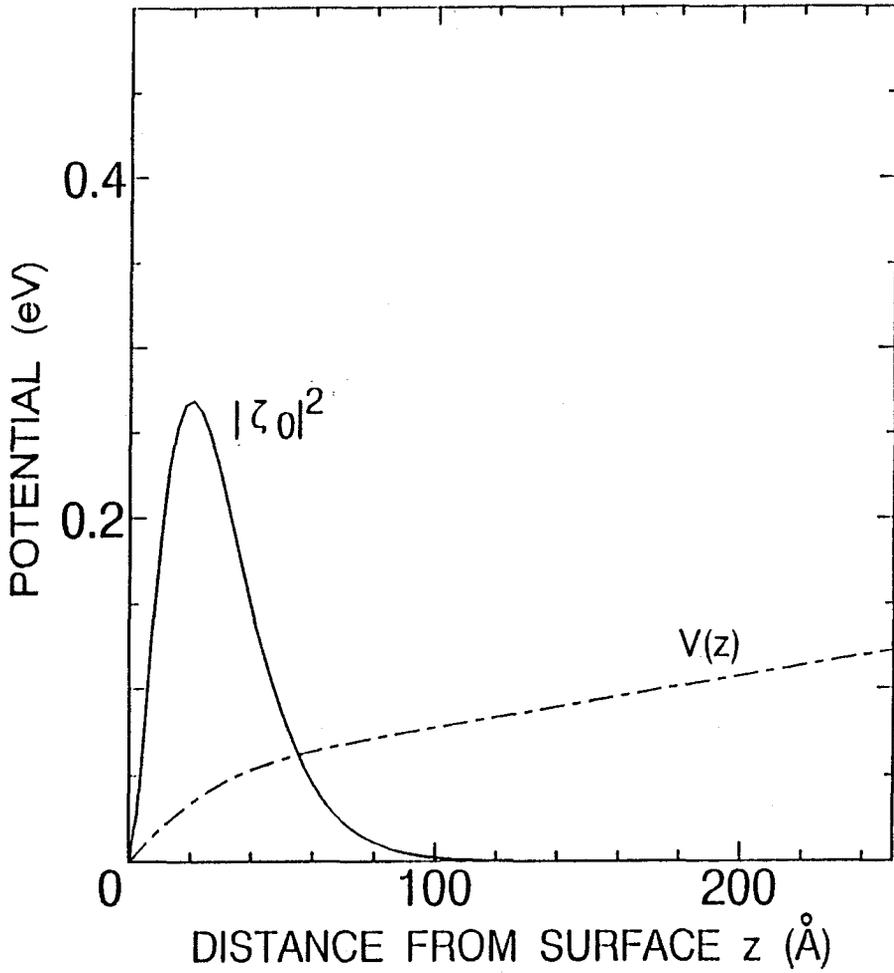


図 2.14 反転電子密度 $N_{inv} = 1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ 、アクセプタ密度 $N_A = 1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ で、(100) Si 反転層内における変分法により近似的に解いた電子のポテンシャル $V(z)$ と波動関数の自乗 $|\zeta_i|^2$ 。

2-7 結言

Si 反転層内の非常に狭いポテンシャル井戸に閉じ込められた電子は界面に垂直な方向に閉じ込められ、界面に平行な方向にのみ自由な運動をするいわゆる二次元量子化がおこる。その結果バルク Si と異なる性質を示す。この二次元量子化の様子を調べるため、有効質量近似を用いて得られた Schrödinger 方程式と Poisson 方程式を自己無撞着的に解く方法を示し、電子の波動関数、ポテンシャル、サブバンドエネルギー、電子の占有率、および、表面からの電子の平均距離を計算した。得られた結果をまとめると、

- 1) 2DEG の状態密度関数はエネルギーに対し一定である。
- 2) 結晶面に沿う方向の有効質量は結晶面に依存する。
- 3) 反転電子密度が多くなると、電子の閉じ込めが強くなり、サブバンドエネルギーの間隔が広くなり、電子は高いエネルギー準位から低いエネルギー準位へ遷移する。室温においても反転電子密度が多くなると、フェルミエネルギーは基底準位のサブバンドと交差する。
- 4) サブバンドエネルギー、電子の占有率、電子の表面からの距離の値の温度依存性は反転電子密度の場合とほぼ同じ傾向を示すが、フェルミエネルギーは温度の上昇に伴い低くなる。
- 5) 自己無撞着的な解法によって得られた値と変分法や三角ポテンシャルの近似を用いて得られた値を比較すると、変分法で得られた値は電子の閉じ込めが弱く、三角ポテンシャルで得られた値は電子の閉じ込めが強くなっている。

本章の参考文献

- 1) F. Stern : Phys. Rev. **B5** (1972) 4891.
- 2) 川路紳治 : 応用物理 **37** (1968) 744.
- 3) A. P. Gnädinger and H. E. Talley : Solid-State Electronics **13** (1970) 1301.
- 4) F. Stern and W. E. Howard : Phys. Rev. **163** (1967) 816.
- 5) T. Ando : J. Phys. Soc. Jpn. **51** (1982) 3893.
- 6) T. Ando : J. Phys. Soc. Jpn. **51** (1982) 3900.
- 7) C. Hamaguchi, K. Miyatsuji and H. Hihara : Jpn. J. Appl. Phys. **23** (1984) L132.
- 8) H. Hihara and C. Hamaguchi : Solid State Commum. **54** (1985) 485.
- 9) M. Abramowitz and I. A. Stegun : *Handbook of Mathematical Functions*, (U. S. GPO, Washington D. C. , 1964) p446.

第 3 章 二次元電子ガス状態の散乱過程に関する理論的考察

3-1 緒言

二次元電子ガスの移動度は二次元電子ガス状態とその散乱過程で決定される。2 章では二次元電子ガス状態の計算方法について述べたので本章では二次元電子ガスの散乱過程の理論的考察とそれらを用いて移動度を計算する方法について述べる。

一般的に電子の電流は分布関数が分かれば計算することができる。この分布関数はボルツマン輸送方程式を解いて求める。外力が小さく、緩和時間近似が成り立つとして得られる分布関数を用いれば電流密度が計算できるので、この関係から散乱緩和時間のエネルギー平均値が導かれ、移動度が求められる。この散乱緩和時間のエネルギー平均値を求めるためには、個々の散乱因子による散乱確率を求める必要があり、ここでは音響フォノン、インターバレーフォノン、表面粗さ、およびイオン化不純物による散乱について考察する。

2DEG と音響フォノンとの相互作用による理論モデルが Kawaji¹⁾ や Ezawa *et al.*²⁾ により提案されてきたが、ここでは三次元電子と三次元フォノンとの相互作用について述べ、続いて Ridley³⁾ や Price⁴⁾ により提案された 2DEG と三次元フォノンによる相互作用の理論的モデルについて述べる。2DEG と 0 次近似および 1 次近似のインターバレーフォノンによる散乱確率は Ferry⁵⁾ により導出されたが、ここでは 0 次近似のインターバレーフォノンによる散乱確率を Price⁴⁾ の理論を用いて求める。反転電子密度が大きくなると、フェルミエネルギーがサブバンド内に位置するようになり、分布関数で縮退の効果を考慮しなければならない場合が現れる。特に低温や垂直電界（実効電界）高くなるとその傾向が強い。また、5-5 の節で示すようにこの縮退の効果は音響フォノン散乱のように弾性散乱に対しては影響が小さいが、インターバレーフォノン散乱のように非弾性散乱では大きい。そこで縮退の効果を考慮した場合と、考慮しない場合の散乱確率について述べる。Si の反転層内における

電子のように、狭いポテンシャル井戸層に閉じ込められた場合、表面粗さによるポテンシャルのゆらぎが散乱ポテンシャルとなる。Ando *et al.*⁶⁾ により導出されたスクリーニングを考慮した表面粗さによる散乱確率を示し、Hartstein *et al.*⁷⁾ と同じ近似法で実効電界依存性を調べる。低温で反転電子密度が少ない領域ではイオン化した固定電荷による散乱が重要となる。Stern と Howard⁸⁾ により反転電子密度による遮蔽効果を考慮した電氣的量子極限におけるクーロン散乱の理論式が提案されている。ここでは、Price^{9,10)} により提案された遮蔽効果を考慮した一般的なサブバンドにおけるイオン化不純物による散乱の理論式について述べる。

3-2 ボルツマンの輸送方程式

Si 反転層における電子の運動のように、界面に垂直な z 方向に量子化され界面に平行な xy 面内でのみ自由な運動ができる場合のボルツマンの輸送方程式について述べる。

xy 面内の位置ベクトルを \vec{r}_{\parallel} 、電子の波数ベクトルを \vec{k}_{\parallel} とすると、粒子（電子）が時刻 t で、位置ベクトル \vec{r}_{\parallel} の点に存在し、波数ベクトル \vec{k}_{\parallel} を有する確率を $f(\vec{k}_{\parallel}, \vec{r}_{\parallel}, t)$ と定義してこれを分布関数と呼ぶ。粒子が散乱されないとして時刻 $t-dt$ において、 $\vec{r}_{\parallel} - (\partial\vec{r}_{\parallel}/\partial t)dt$ 、 $\vec{k}_{\parallel} - (\partial\vec{k}_{\parallel}/\partial t)dt$ にあった粒子が外力を受けて時間 dt 後に変化した分布関数 $f(\vec{k}_{\parallel}, \vec{r}_{\parallel}, t)$ の時間変化割合は、

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{\text{drift}} = \left[f\left(\vec{k}_{\parallel} - \frac{\partial\vec{k}_{\parallel}}{\partial t}dt, \vec{r}_{\parallel} - \frac{\partial\vec{r}_{\parallel}}{\partial t}dt, t-dt\right) - f(\vec{k}_{\parallel}, \vec{r}_{\parallel}, t) \right] / dt, \quad (3.2.1)$$

と表せてドリフト項と呼ばれている。ここで、右辺の第一項をテーラ展開すると、

$$\begin{aligned} & f\left(\vec{k}_{\parallel} - \frac{\partial\vec{k}_{\parallel}}{\partial t}dt, \vec{r}_{\parallel} - \frac{\partial\vec{r}_{\parallel}}{\partial t}dt, t-dt\right) \\ &= f(\vec{k}_{\parallel}, \vec{r}_{\parallel}, t) - \left[\frac{\partial\vec{k}_{\parallel}}{\partial t} \cdot \frac{\partial f}{\partial\vec{k}_{\parallel}} + \frac{\partial\vec{r}_{\parallel}}{\partial t} \cdot \frac{\partial f}{\partial\vec{r}_{\parallel}} + \frac{\partial f}{\partial t} \right] dt + \dots \\ &\equiv f(\vec{k}_{\parallel}, \vec{r}_{\parallel}, t) - \left[\left(\frac{\partial\vec{k}_{\parallel}}{\partial t} \cdot \nabla_{\vec{k}_{\parallel}} f \right) + \left(\frac{\partial\vec{r}_{\parallel}}{\partial t} \cdot \nabla_{\vec{r}_{\parallel}} f \right) + \frac{\partial f}{\partial t} \right] dt + \dots, \quad (3.2.2) \end{aligned}$$

となる。ここに、

$$\frac{\partial \vec{k}_{\parallel}}{\partial t} \cdot \nabla_{\vec{k}_{\parallel}} f = \frac{\partial \vec{k}_{\parallel}}{\partial t} \cdot \text{grad}_{\vec{k}_{\parallel}} f = \frac{\partial k_x}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial k_x} + \frac{\partial k_y}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial k_y}, \quad (3.2.3)$$

$$\frac{\partial \vec{r}_{\parallel}}{\partial t} \cdot \nabla_{\vec{r}_{\parallel}} f = \vec{v}_{\parallel} \cdot \text{grad}_{\vec{r}_{\parallel}} f = v_x \frac{\partial f}{\partial x} + v_y \frac{\partial f}{\partial y}, \quad (3.2.4)$$

である。ただし、 \vec{v}_{\parallel} は xy 面内の速度である。式 (3.2.2) の第二項までを考え、これを式 (3.2.1) に代入すると、ドリフト項は次のようになる

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{\text{drift}} = -\left[\frac{\partial \vec{k}_{\parallel}}{\partial t} \cdot \nabla_{\vec{k}_{\parallel}} f + \vec{v}_{\parallel} \cdot \nabla_{\vec{r}_{\parallel}} f + \frac{\partial f}{\partial t}\right], \quad (3.2.5)$$

外力 \vec{F}_{\parallel} のもとでの波数ベクトル \vec{k}_{\parallel} の変化は

$$\hbar \frac{\partial \vec{k}_{\parallel}}{\partial t} = \vec{F}_{\parallel}, \quad (3.2.6)$$

で与えられるから

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{\text{drift}} = -\left[\frac{1}{\hbar} \vec{F}_{\parallel} \cdot \nabla_{\vec{k}_{\parallel}} f + \vec{v}_{\parallel} \cdot \nabla_{\vec{r}_{\parallel}} f + \frac{\partial f}{\partial t}\right], \quad (3.2.7)$$

一方、粒子は衝突によってその状態を変えるので、この衝突による分布関数の変化割合を $(df/dt)_{\text{coll}}$ とすると、つりあいから

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{\text{drift}} + \left(\frac{df}{dt}\right)_{\text{coll}} = 0, \quad (3.2.8)$$

が成り立つ。これを式 (3.2.7) に代入すると、

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \vec{F}_{\parallel} \cdot \nabla_{\vec{k}_{\parallel}} f + \vec{v}_{\parallel} \cdot \nabla_{\vec{r}_{\parallel}} f = \left(\frac{df}{dt}\right)_{\text{coll}}, \quad (3.2.9)$$

が得られる。この式をボルツマンの輸送方程式と呼ぶ。

3-3 衝突項と緩和時間

電子の分布関数は、結晶が均一で場所 \vec{r}_{\parallel} に依存しないものとし $f(\vec{k}_{\parallel})$ とおく。衝突による $f(\vec{k}_{\parallel})$ の変化は、 \vec{k}_{\parallel} 以外のあらゆる \vec{k}'_{\parallel} の状態から \vec{k}_{\parallel} なる状態に遷移することにより分布関数 $f(\vec{k}_{\parallel})$ が増加する割合と、 \vec{k}_{\parallel} の状態から他のあらゆる \vec{k}'_{\parallel} の状態に遷移することによって $f(\vec{k}_{\parallel})$ の減少する割合を考えればよい。単位時間当たりのそれぞれの遷移確率を $P(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel})$ と $P(\vec{k}'_{\parallel}, \vec{k}_{\parallel})$ とおくと、衝突項は次のように書ける

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{\text{coll}} = \sum_{\vec{k}'_{\parallel}} \left\{ P(\vec{k}'_{\parallel}, \vec{k}_{\parallel}) f(\vec{k}'_{\parallel}) [1 - f(\vec{k}_{\parallel})] - P(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}) f(\vec{k}_{\parallel}) [1 - f(\vec{k}'_{\parallel})] \right\}, \quad (3.3.1)$$

ここで、遷移確率 P にかかる係数 $f(\vec{k}'_{\parallel}) [1 - f(\vec{k}_{\parallel})]$ は、始状態 \vec{k}'_{\parallel} に電子がいて \vec{k}_{\parallel} なる状態に電子がない確率を表している。

3-3-1 縮退していない場合

フェルミ準位が伝導帯の底よりも下にある場合、 $f(\vec{k}_{\parallel}) \ll 1$ 、 $f(\vec{k}'_{\parallel}) \ll 1$ であるから、熱平衡状態の分布関数を $f_0(\vec{k}_{\parallel})$ とすると、式 (3.3.1) において $(df/dt)_{\text{coll}} = 0$ より、

$$P(\vec{k}'_{\parallel}, \vec{k}_{\parallel}) f_0(\vec{k}'_{\parallel}) = P(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}) f_0(\vec{k}_{\parallel}), \quad (3.3.2)$$

が成立する。これを詳細平衡の原理とよぶ。この関係を用いると、式 (3.3.1) は

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{\text{coll}} = - \sum_{\vec{k}'_{\parallel}} P(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}) \left[f(\vec{k}_{\parallel}) - f(\vec{k}'_{\parallel}) \frac{f_0(\vec{k}_{\parallel})}{f_0(\vec{k}'_{\parallel})} \right], \quad (3.3.3)$$

となる。 \vec{k}'_{\parallel} についての和を積分に置き換えると

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{\text{coll}} = - \frac{A}{(2\pi)^2} \int d^2 \vec{k}'_{\parallel} P(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}) \left[f(\vec{k}_{\parallel}) - f(\vec{k}'_{\parallel}) \frac{f_0(\vec{k}_{\parallel})}{f_0(\vec{k}'_{\parallel})} \right], \quad (3.3.4)$$

と書くことができる。ここで、 A は結晶の面積である。

外力が小さく、分布関数の熱平衡状態からのずれが小さいときには、

$$f(\vec{k}_{\parallel}) = f_0(\vec{k}_{\parallel}) + f_1(\vec{k}_{\parallel}) \quad \left[f_1(\vec{k}_{\parallel}) \ll f_0(\vec{k}_{\parallel}) \right], \quad (3.3.5)$$

とおくことができる。一回の衝突によるエネルギーの変化が小さい弾性衝突の場合、 $f_0(\vec{k}_{\parallel}) \cong f_0(\vec{k}'_{\parallel})$ となるから式 (3.3.4) は

$$\begin{aligned} \left(\frac{df}{dt} \right)_{\text{coll}} &= -f_1(\vec{k}_{\parallel}) \frac{A}{(2\pi)^2} \int d^2 \vec{k}'_{\parallel} P(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}) \left[1 - \frac{f_1(\vec{k}'_{\parallel})}{f_1(\vec{k}_{\parallel})} \right] \\ &\equiv -\frac{f_1(\vec{k}_{\parallel})}{\tau_{11}}(\vec{k}_{\parallel}) \equiv -\frac{f(\vec{k}_{\parallel}) - f_0(\vec{k}_{\parallel})}{\tau_{11}(\vec{k}_{\parallel})}, \end{aligned} \quad (3.3.6)$$

となり、ここで、緩和時間 $\tau_{11}(\vec{k}_{\parallel})$ は、

$$\frac{1}{\tau_{11}(\vec{k}_{\parallel})} = \frac{A}{(2\pi)^2} \int d^2 \vec{k}'_{\parallel} P(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}) \left[1 - \frac{f_1(\vec{k}'_{\parallel})}{f_1(\vec{k}_{\parallel})} \right], \quad (3.3.7)$$

で与えられ、電子の波数ベクトル \vec{k}_{\parallel} (電子のエネルギー) の関数である。

緩和時間近似が成立する場合には、ボルツマンの輸送方程式は次のようになる

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \vec{F}_{\parallel} \cdot \nabla_{\vec{k}_{\parallel}} f + \vec{v}_{\parallel} \cdot \nabla_{\vec{\tau}_{\parallel}} f = -\frac{f - f_0}{\tau_{11}} = -\frac{f_1}{\tau_{11}}, \quad (3.3.8)$$

空間的に均一な場合を考え $\nabla_{\vec{\tau}_{\parallel}} f = 0$ とおき、かつ定常状態を仮定し、 $\partial f / \partial t = 0$ とおくと、

$$\frac{1}{\hbar} \vec{F}_{\parallel} \cdot \nabla_{\vec{k}_{\parallel}} f = -\frac{f_1}{\tau_{11}}, \quad (3.3.9)$$

となる。外力が x 方向に働くものとする、

$$f_1 = -\frac{\tau_{11}}{\hbar} F_x \frac{\partial f}{\partial k_x}, \quad (3.3.10)$$

を得る。電子のエネルギー E は等方的な有効質量 m^* を仮定すると、式 (2.4.10) より

$E = E_i + \hbar^2 k_{\parallel}^2 / 2m^*$ と表されるので、

$$f_1 = -\frac{\tau_{11}}{\hbar} F_x \frac{\partial f}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial k_x} = -\tau_{11} v_x F_x \frac{\partial f}{\partial E}, \quad (3.3.11)$$

となる。ここで $\hbar k_x = m^* v_x$ の関係を用いた。上式において外力が小さく、分布関数の熱平衡状態からのずれが小さい時には、

$$f = f_0 + f_1 \quad (f_0 \gg f_1), \quad (3.3.12)$$

とおくことができ、式 (3.3.11) は

$$f_1 = -\tau_{11} v_x F_x \frac{\partial f_0}{\partial E}, \quad (3.3.13)$$

と近似できる。式 (3.3.13) の関係を用いると、式 (3.3.7) の緩和時間 $\tau_{11}(\vec{k}_{\parallel})$ は

$$\frac{1}{\tau_{11}(\vec{k}_{\parallel})} = \frac{A}{(2\pi)^2} \int d^2 \vec{k}'_{\parallel} P(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}) \left[1 - \frac{k_{x'}}{k_x} \right], \quad (3.3.14)$$

と表される。

3-3-2 縮退のある場合

フェルミエネルギーが伝導帯の中に位置する場合、 $[1 - f(\vec{k}_{\parallel})]$ や $[1 - f(\vec{k}'_{\parallel})]$ の項を 1 で近似することはできない。この場合の詳細平衡は

$$\begin{aligned} P(\vec{k}'_{\parallel}, \vec{k}_{\parallel}) f_0(\vec{k}'_{\parallel}) [1 - f_0(\vec{k}_{\parallel})] &= P(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}) f_0(\vec{k}_{\parallel}) [1 - f_0(\vec{k}'_{\parallel})] \\ &= V(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}) = V(\vec{k}'_{\parallel}, \vec{k}_{\parallel}), \end{aligned} \quad (3.3.15)$$

で与えられる。分布関数をフェルミ分布関数を考え、緩和時間近似が成立するとし、かつ、分布関数のずれが小さいとして式 (3.3.8) と式 (3.3.12) の関係が成立するものとする。このとき、

$$f_1 = -\tau_{11} v_x F_x \frac{\partial f_0}{\partial E} = \tau_{11} v_x F_x \frac{1}{k_B T} f_0 (1 - f_0), \quad (3.3.16)$$

ここでフェルミ分布関数は

$$f_0 = 1 / \left[1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) \right], \quad (3.3.17)$$

で、 k_B はボルツマン定数、 E_F はフェルミエネルギーである。この結果、式 (3.3.16) は

$$f_1 = C_x(\vec{k}_\parallel) \frac{1}{k_B T} f_0(1 - f_0), \quad (3.3.18)$$

と表せる。ここに、

$$C_x(\vec{k}_\parallel) = \tau_{11}(\vec{k}_\parallel) v_x F_x = \frac{\tau_{11}(\vec{k}_\parallel) \hbar k_x}{m^*} F_x, \quad (3.3.19)$$

である。

式 (3.3.18) を式 (3.3.1) に代入し、 f_1^2 の項は小さいものとして無視すると、

$$\begin{aligned} \left(\frac{df}{dt}\right)_{\text{coll}} &= \sum_{\vec{k}'_\parallel} \left\{ P(\vec{k}'_\parallel, \vec{k}_\parallel) \left[f_0(\vec{k}'_\parallel) + f_1(\vec{k}'_\parallel) \right] \left[1 - f_0(\vec{k}_\parallel) - f_1(\vec{k}_\parallel) \right] \right. \\ &\quad \left. - P(\vec{k}_\parallel, \vec{k}'_\parallel) \left[f_0(\vec{k}_\parallel) + f_1(\vec{k}_\parallel) \right] \left[1 - f_0(\vec{k}'_\parallel) - f_1(\vec{k}'_\parallel) \right] \right\} \\ &= \sum_{\vec{k}'_\parallel} \left\{ P(\vec{k}'_\parallel, \vec{k}_\parallel) \left[-f_0(\vec{k}'_\parallel) f_0(\vec{k}_\parallel) \left[1 - f_0(\vec{k}_\parallel) \right] \frac{C_x(\vec{k}_\parallel)}{k_B T} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + f_0(\vec{k}'_\parallel) \left[1 - f_0(\vec{k}'_\parallel) \right] \left[1 - f_0(\vec{k}_\parallel) \right] \frac{C_x(\vec{k}'_\parallel)}{k_B T} \right] \right. \\ &\quad \left. - P(\vec{k}_\parallel, \vec{k}'_\parallel) \left[-f_0(\vec{k}_\parallel) f_0(\vec{k}'_\parallel) \left[1 - f_0(\vec{k}'_\parallel) \right] \frac{C_x(\vec{k}'_\parallel)}{k_B T} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + f_0(\vec{k}_\parallel) \left[1 - f_0(\vec{k}_\parallel) \right] \left[1 - f_0(\vec{k}'_\parallel) \right] \frac{C_x(\vec{k}_\parallel)}{k_B T} \right] \right\}, \quad (3.3.20) \end{aligned}$$

上式に詳細平衡の式 (3.3.15) を用いると、

$$\begin{aligned} \left(\frac{df}{dt}\right)_{\text{coll}} &= \frac{1}{k_B T} \sum_{\vec{k}'_\parallel} V(\vec{k}'_\parallel, \vec{k}_\parallel) \left[C_x(\vec{k}'_\parallel) - C_x(\vec{k}_\parallel) \right] \\ &= \frac{1}{k_B T} f_0(\vec{k}_\parallel) C_x(\vec{k}_\parallel) \sum_{\vec{k}'_\parallel} P(\vec{k}_\parallel, \vec{k}'_\parallel) \left[1 - f_0(\vec{k}'_\parallel) \right] \left(\frac{k_{x'}}{k_x} - 1 \right) \\ &\equiv \frac{f_1(\vec{k}_\parallel)}{\tau_{11}(\vec{k}_\parallel)}, \quad (3.3.21) \end{aligned}$$

つまり、

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{11}(\vec{k}_{\parallel})} &= \frac{1}{1-f_0(\vec{k}_{\parallel})} \sum_{\vec{k}'_{\parallel}} P(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}) [1-f_0(\vec{k}'_{\parallel})] \left(1 - \frac{k_x'}{k_x}\right) \\ &= \frac{1}{1-f_0(\vec{k}_{\parallel})} \frac{A}{(2\pi)^2} \int d^2\vec{k}'_{\parallel} P(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}) [1-f_0(\vec{k}'_{\parallel})] \left(1 - \frac{k_x'}{k_x}\right), \end{aligned} \quad (3.3.22)$$

となる。上式において遷移確率 $P(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel})$ が 0 でなく有限の値でも衝突後の電子状態が占有されていれば $1-f_0(\vec{k}'_{\parallel})=0$ となり遷移が許されない。

3-4 二次元電子ガスの移動度

一般に、電子による電流はその分布関数がわかれば計算できる。ここでは、ボルツマンの輸送方程式の微分方程式に、緩和時間近似を仮定して得られた分布関数を電流密度の式に代入して移動度を求める式を導く。

3.3 衝突項と緩和時間の節で述べたように、外力が小さく分布関数の熱平衡状態からのずれが小さいとすると

$$f = f_0 + f_1 \quad (f_0 \gg f_1), \quad (3.4.1)$$

とおくことができ、緩和時間近似が成り立つ時のボルツマンの輸送方程式より分布関数のずれ f_1 は

$$f_1 = -\tau_{11} v_x F_x \frac{\partial f_0}{\partial E}, \quad (3.4.2)$$

と近似できる。

ここで、電界を x 方向に印可した時の分布関数は $F_x = -eE_x$ として、

$$f(\vec{k}_{\parallel}) = f_0(\vec{k}_{\parallel}) + eE_x \tau_{11} v_x \frac{\partial f_0}{\partial E}, \quad (3.4.3)$$

で与えられる。 x 方向の電流密度は、

$$J_x = \frac{2}{(2\pi)^2} \int (-e) v_x f(\vec{k}_{\parallel}) d^2\vec{k}_{\parallel}$$

$$= -\frac{e}{2\pi^2} \int v_x f_0(\vec{k}_{\parallel}) d^2 \vec{k}_{\parallel} - \frac{e^2 E_x}{2\pi^2} \int \tau_{11} v_x^2 \frac{\partial f_0}{\partial E} d^2 \vec{k}_{\parallel}. \quad (3.4.4)$$

ここで、因子 2 はスピンを考慮したためである。上式の右辺の第一項において、 $v_x f_0(\vec{k}_{\parallel})$ は k_x に関して奇関数であるから、 k_x で $-\infty$ から $+\infty$ まで積分すると、結局第一項は 0 となり、

$$J_x = -\frac{e^2 E_x}{2\pi^2} \int \tau_{11} v_x^2 \frac{\partial f_0}{\partial E} d^2 \vec{k}_{\parallel}, \quad (3.4.5)$$

となる。電子密度を n とすると、

$$n = \frac{2}{(2\pi)^2} \int f_0 d^2 \vec{k}_{\parallel}, \quad (3.4.6)$$

であるから、これを用いると式 (3.4.5) は、

$$J_x = -e^2 n E_x \int_0^{\infty} \tau_{11} v_x^2 \frac{df_0}{dE} d^2 \vec{k}_{\parallel} \Big/ \int_0^{\infty} f_0 d^2 \vec{k}_{\parallel}, \quad (3.4.7)$$

となる。式 (2.4.10) で表されるように i 番目のサブバンドにおける電子のエネルギー $E_i(\vec{k}_{\parallel}) = E$ は m^* を xy 面に等方的な有効質量とすると

$$E = E_i + \frac{\hbar^2}{2m^*} \vec{k}_{\parallel}^2 = E_i + \frac{m^*}{2} \vec{v}_{\parallel}^2, \quad (3.4.8)$$

となる。ただし、 $\hbar \vec{k}_{\parallel} = m^* \vec{v}_{\parallel}$ である。 v_x^2 の平均値を $\langle v_x^2 \rangle$ と書くと $\langle v_x^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle$ であるから、

$$\langle v_x^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle v_x^2 + v_y^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle \vec{v}_{\parallel}^2 \rangle = \frac{\langle E - E_i \rangle}{m^*}, \quad (3.4.9)$$

となり、上式を式 (3.4.7) に代入すると

$$J_x = -\frac{e^2 n E_x}{m^*} \int_0^{\infty} \tau_{11} (E - E_i) \frac{df_0}{dE} d^2 \vec{k}_{\parallel} \Big/ \int_0^{\infty} f_0 d^2 \vec{k}_{\parallel}, \quad (3.4.10)$$

となり、この式の \vec{k}_{\parallel} に関する積分をエネルギー E に関する積分に変換すると、

$$J_x = -\frac{e^2 n E_x}{m^*} \int_{E_i}^{\infty} \tau_{11} (E - E_i) \frac{df_0(E)}{dE} dE \Big/ \int_{E_i}^{\infty} f_0(E) dE, \quad (3.4.11)$$

となる。ここで、 $E - E_i = E'$ とおくと電流密度の式は

$$J_x = -\frac{e^2 n E_x}{m^*} \int_0^\infty \tau_{11} E' \frac{df_0(E' + E_i)}{dE'} dE' \Big/ \int_0^\infty f_0(E' + E_i) dE', \quad (3.4.12)$$

となり、 E' を E と書き変えると上式は

$$J_x = -\frac{e^2 n E_x}{m^*} \int_0^\infty \tau_{11} E \frac{df_0(E + E_i)}{dE} dE \Big/ \int_0^\infty f_0(E + E_i) dE, \quad (3.4.13)$$

となる。電流密度を

$$J_x = \frac{ne^2 E_x}{m^*} \langle \tau_{11} \rangle, \quad (3.4.14)$$

と表すと、

$$\langle \tau_{11} \rangle = - \int_0^\infty E \tau_{11} \frac{df_0(E + E_i)}{dE} dE \Big/ \int_0^\infty f_0(E + E_i) dE, \quad (3.4.15)$$

である。 $\langle \tau_{11} \rangle$ は散乱緩和時間のエネルギー平均値を表す。

縮退のある場合は、分布関数 f_0 にフェルミ-ディラック分布関数

$$f_0(E) = 1 \Big/ \left[1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) \right], \quad (3.4.16)$$

を用いて、式 (3.4.15) に代入すると

$$\langle \tau_{11} \rangle = \frac{\int_0^\infty E \tau_{11} f_0(E + E_i) [1 - f_0(E + E_i)] dE}{\int_0^\infty E f_0(E + E_i) [1 - f_0(E + E_i)] dE}, \quad (3.4.17)$$

を得る。ここで、

$$\frac{df_0(E)}{dE} = -\frac{1}{k_B T} f_0(E) [1 - f_0(E)], \quad (3.4.18)$$

を用いた。

縮退を考慮しない場合は、分布関数にマックスウェル-ボルツマン分布関数

$$f_0(E) = A \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right), \quad (3.4.19)$$

を用いて計算すると、散乱緩和時間のエネルギー平均値は

$$\langle \tau_{11} \rangle = \frac{\int E \tau_{11} f_0 dE}{\int E f_0 dE}, \quad (3.4.20)$$

で与えられる。

移動度 μ は $\langle \tau_{11} \rangle$ を用いて、

$$\mu = \frac{e \langle \tau_{11} \rangle}{m^*}, \quad (3.4.21)$$

で与えられる。実際の電子の移動度は種々の散乱によって決定されるので、個々の散乱プロセスによる散乱緩和時間を τ_{11}^i とすると全ての散乱プロセスを含んだ散乱緩和時間 τ_{11} は次の式で与えられる、

$$\frac{1}{\tau_{11}} = \sum_i \frac{1}{\tau_{11}^i}, \quad (3.4.22)$$

種々の散乱プロセスを含んだ散乱緩和時間のエネルギー平均値は、式 (3.4.22) を式 (3.4.17) または (3.4.20) に代入して得られる。

3-5 電子とフォノンの相互作用

先ず、三次元電子と三次元フォノンとの相互作用の理論について述べ、次に Ridley³⁾ や Price⁴⁾ によって示された二次元電子ガスと三次元フォノンとの相互作用について述べる。

3-5-1 三次元電子とフォノンの相互作用

始状態の波数ベクトル \vec{k} の電子が運動量 \vec{q} のフォノンにより散乱されて終状態の波数ベクトル \vec{k}' になる確率は¹¹⁾、変形ポテンシャルの項を電子-フォノンの相互作用による摂動ハミルトニアンと考え、その摂動項を H_{ep} とすると

$$P(\vec{k} \xrightarrow{\vec{q}} \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_{ep} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i), \quad (3.5.1)$$

で与えられる。ここで f と i は系の終状態と始状態を、 E_f と E_i は系の終状態と始状態のエネルギーを表し、 $\delta(E_f - E_i)$ は Kronecker の δ 記号でエネルギー保存則を意味している、又、摂動ハミルトニアン H_{ep} は次のように表される¹²⁾

$$H_{ep} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{q}} C_{\vec{q}} [a_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} - a_{\vec{q}}^\dagger e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}], \quad (3.5.2)$$

ここで V は体積、 $C_{\vec{q}}$ はカップリングの強さ、 $a_{\vec{q}}$ と $a_{\vec{q}}^\dagger$ はそれぞれ消滅と生成のオペレータである。Bloch の定理より電子の波動関数 $\Psi(\vec{r})$ は

$$\Psi(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad (3.5.3)$$

と表せるので、始状態の波動関数は、

$$| i \rangle = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \Phi_{N_{\vec{q}}}, \quad (3.5.4)$$

で表され、これは \vec{k} の Bloch 関数と \vec{q} で表されるフォノンが $N_{\vec{q}}$ 個ある状態を示している。

散乱確率の式 (3.5.1) の行列要素が零でないためには終状態の波動関数は

$$| f \rangle = u_{\vec{k}'}(\vec{r}) e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}} \Phi_{(N_{\vec{q}}-1)}, \quad (3.5.5)$$

となる必要がある。式 (3.5.2) の右辺の第一項の行列要素の絶対値は

$$|\langle f | \frac{C_{\vec{q}}}{\sqrt{V}} a_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | i \rangle| = \frac{|C_{\vec{q}}|}{\sqrt{V}} \sqrt{N_{\vec{q}}} \int u_{\vec{k}'}^*(\vec{r}) u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}'+\vec{q})\cdot\vec{r}} d\vec{r}, \quad (3.5.6)$$

となり、上の積分は $u_{\vec{k}'}^*(\vec{r})u_{\vec{k}}(\vec{r})$ が Bloch 関数の格子の周期性を持つ項の積分であるから、 $\vec{k} - \vec{k}' + \vec{q}$ が逆格子ベクトルに等しいときのみ非零となる。よって Kronecker の δ 記号を用いて

$$|\langle f | \frac{C_{\vec{q}}}{\sqrt{V}} a_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | i \rangle| = \frac{|C_{\vec{q}}|}{\sqrt{V}} \sqrt{N_{\vec{q}}} \int u_{\vec{k}'}^*(\vec{r}) u_{\vec{k}}(\vec{r}) d\vec{r} \delta_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}'}, \quad (3.5.7)$$

となり、また、

$$\int u_{\vec{k}'}^*(\vec{r}) u_{\vec{k}}(\vec{r}) d\vec{r} \simeq 1, \quad (3.5.8)$$

と近似して

$$|\langle f | \frac{C_{\vec{q}}}{\sqrt{V}} a_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | i \rangle| = \frac{|C_{\vec{q}}|}{\sqrt{V}} \sqrt{N_{\vec{q}}} \delta_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}'}, \quad (3.5.9)$$

となる。この行列要素が零にならないのは Kronecker の δ 記号の性質より

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}, \quad (3.5.10)$$

が成り立つとき、つまり運動量が電子とフォノンの間で保存される場合に限られる。同様に、式 (3.5.2) の右辺の第二項の行列要素は

$$|\langle f | \frac{-C_{\vec{q}}}{\sqrt{V}} a_{\vec{q}}^\dagger e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | i \rangle| = \frac{|C_{\vec{q}}|}{\sqrt{V}} \sqrt{N_{\vec{q}}+1} \delta_{\vec{k}-\vec{q},\vec{k}'}, \quad (3.5.11)$$

となる。以上まとめると電子の遷移確率 P は

$$P(\vec{k} \xrightarrow{\vec{q}} \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{C_{\vec{q}}^2}{V} \left(N_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \times \delta \left[E(\vec{k}') - E(\vec{k}) \pm \hbar\omega_{\vec{q}} \right] \delta_{\vec{k},\vec{k}' \mp \vec{q}}, \quad (3.5.12)$$

となり、符号 $\pm(\mp)$ の上側はフォノンの吸収過程を下側は放出過程を表す。波数ベクトル \vec{k} で示される状態の電子が許される全ての状態に散乱される確率は、全てのフォノン \vec{q} と全ての終状態の波数ベクトル \vec{k}' について和をとればよいから

$$\sum_{\vec{k}'} \sum_{\vec{q}} P(\vec{k} \xrightarrow{\vec{q}} \vec{k}'), \quad (3.5.13)$$

となり、これは Kronecker の δ の性質を用いて \vec{k}' のみについての和に変えられる。つまり

$$\sum_{\vec{k}'} \sum_{\vec{q}} \delta_{\vec{k} \pm \vec{q}, \vec{k}'} \rightarrow \sum_{\vec{k}' (\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q})} \quad (3.5.14)$$

となるから、三次元電子の散乱緩和時間を $\tau_{III}(\vec{k})$ とすると縮退を考慮しない場合の散乱確率は

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{III}(\vec{k})} &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 \vec{k}' P(\vec{k} - \vec{q}, \vec{k}') \left(1 - \frac{k_{x'}}{k_x}\right) \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 \vec{k}' \frac{2\pi}{\hbar} \frac{C_{\vec{q}}^2}{V} \left(N_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right) \\ &\quad \times \delta[E(\vec{k}') - E(\vec{k}) \pm \hbar\omega_{\vec{q}}] \left(1 - \frac{k_{x'}}{k_x}\right), \end{aligned} \quad (3.5.15)$$

となり、縮退を考慮した場合は

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{III}(\vec{k})} &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 \vec{k}' P(\vec{k} - \vec{q}, \vec{k}') \frac{[1 - f_0(\vec{k}')] }{[1 - f_0(\vec{k})]} \left(1 - \frac{k_{x'}}{k_x}\right) \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 \vec{k}' \frac{2\pi}{\hbar} \frac{C_{\vec{q}}^2}{V} \left(N_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right) \frac{[1 - f_0(\vec{k}')] }{[1 - f_0(\vec{k})]} \\ &\quad \times \delta[E(\vec{k}') - E(\vec{k}) \pm \hbar\omega_{\vec{q}}] \left(1 - \frac{k_{x'}}{k_x}\right), \end{aligned} \quad (3.5.16)$$

となる。

3-5-2 二次元電子ガスとフォノンの相互作用

Bloch 関数で表される三次元電子の波動関数に対し、狭いポテンシャルの井戸内に閉じこめられ、界面に垂直な方向に量子化された電子の波動関数 Ψ_i は式 (2.4.2) より

$$\Psi_i(\vec{r}_{\parallel}, z) = u_{\vec{k}_{\parallel}}(\vec{r}_{\parallel}) e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel}} \zeta_i(z), \quad (3.5.17)$$

と表される。ここで面積は単位面積とした。始状態がサブバンド m 、電子の波数ベクトル \vec{k}_{\parallel} の二次元電子ガスが三次元フォノン \vec{q} を介して終状態がサブバンド n 、電子の波数ベクトル \vec{k}'_{\parallel} に散乱されるとする。始状態と終状態の電子エネルギーはそれぞれ式 (2.4.10) より

$$E_m(\vec{k}_{\parallel}) = E_m + \frac{\hbar^2}{2m^*} \vec{k}_{\parallel}^2, \quad (3.5.18)$$

$$E_n(\vec{k}'_{\parallel}) = E_n + \frac{\hbar^2}{2m'^*} \vec{k}'_{\parallel}{}^2, \quad (3.5.19)$$

で与えられ、ここで E_m と E_n はそれぞれ m 番目と n 番目のサブバンドの底のエネルギーで、 m^* と m'^* はそれぞれ始状態と終状態における界面に平行な等方的有効質量である。この関係を用いると 2DEG のフォノン散乱に対しても、三次元電子の場合と同じ方法で散乱確率を求めることができる。

式 (3.5.2) のフォノン吸収項の行列要素の絶対値は

$$\begin{aligned} |\langle f | \frac{C_{\vec{q}}}{\sqrt{V}} a_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | i \rangle| &= \frac{|C_{\vec{q}}|}{\sqrt{V}} \sqrt{N_{\vec{q}}} \int \zeta_n^*(z) \zeta_m(z) u_{\vec{k}'_{\parallel}}^*(\vec{r}) u_{\vec{k}_{\parallel}}(\vec{r}) \\ &\quad \times e^{i(\vec{k}_{\parallel} - \vec{k}'_{\parallel}) \cdot \vec{r}_{\parallel}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} d^3 \vec{r}, \end{aligned} \quad (3.5.20)$$

となり、ここで、 $\vec{q} \cdot \vec{r} = \vec{q}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel} + q_z z$, $d^3 \vec{r} = d^2 \vec{r}_{\parallel} dz$ であることを考慮すると

$$\begin{aligned} |\langle f | \frac{C_{\vec{q}}}{\sqrt{V}} a_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | i \rangle| &= \frac{|C_{\vec{q}}|}{\sqrt{V}} \sqrt{N_{\vec{q}}} \int \zeta_n^*(z) \zeta_m(z) e^{iq_z z} dz \\ &\quad \times \int u_{\vec{k}'_{\parallel}}^*(\vec{r}) u_{\vec{k}_{\parallel}}(\vec{r}) e^{i(\vec{k}_{\parallel} - \vec{k}'_{\parallel}) \cdot \vec{r}_{\parallel}} e^{i\vec{q}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel}} d^2 \vec{r}_{\parallel} \\ &= \frac{|C_{\vec{q}}|}{\sqrt{V}} \sqrt{N_{\vec{q}}} I_{mn}(q_z) \delta_{\vec{k}_{\parallel} + \vec{q}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}}, \end{aligned} \quad (3.5.21)$$

となる。ただし、

$$I_{mn}(q_z) = \int \zeta_n^*(z) \zeta_m(z) e^{\pm i q_z z} dz, \quad (3.5.22)$$

である。同様に式 (3.5.2) のフォノンの放出項の行列要素の絶対値は

$$\left| \langle f | \frac{-C_{\vec{q}}}{\sqrt{V}} a_{\vec{q}}^\dagger e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | i \rangle \right| = \frac{|C_{\vec{q}}|}{\sqrt{V}} \sqrt{N_{\vec{q}} + 1} I_{mn}(q_z) \delta_{\vec{k}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}}, \quad (3.5.23)$$

となる。よって、始状態がサブバンド m 、波数ベクトルが \vec{k}_{\parallel} の電子が三次元フォノン \vec{q} を介して、終状態がサブバンド n 、波数ベクトルが \vec{k}'_{\parallel} に遷移する確率は

$$P(m, \vec{k}_{\parallel} \xrightarrow{\vec{q}} n, \vec{k}'_{\parallel}) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{C_{\vec{q}}^2}{V} |I_{mn}(q_z)|^2 \left(N_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \times \delta \left[E_n(\vec{k}'_{\parallel}) - E_m(\vec{k}_{\parallel}) \pm \hbar \omega_{\vec{q}} \right], \quad (3.5.24)$$

となる。波数ベクトル \vec{k}_{\parallel} で示される状態の電子が散乱される確率は全てのフォノン \vec{q} と全ての終状態 \vec{k}'_{\parallel} についての和をとればよいから

$$\sum_{\vec{k}'_{\parallel}} \sum_{\vec{q}} P(m, \vec{k}_{\parallel} \xrightarrow{\vec{q}} n, \vec{k}'_{\parallel}), \quad (3.5.25)$$

となり、Kronecker の δ の性質より

$$\sum_{\vec{k}'_{\parallel}} \sum_{\vec{q}} \delta_{\vec{k}_{\parallel} \pm \vec{q}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}} = \sum_{\vec{k}'_{\parallel}} \sum_{q_z}, \quad (3.5.26)$$

となる。2DEG の散乱緩和時間を $\tau_{11}(\vec{k}_{\parallel})$ とすると、縮退を考慮しない場合の散乱確率は

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{11}(\vec{k}_{\parallel})} &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\vec{k}'_{\parallel}} \int_{q_z} dq_z d^2 \vec{k}'_{\parallel} P(m, \vec{k}_{\parallel} \xrightarrow{\vec{q}} n, \vec{k}'_{\parallel}) \left(1 - \frac{k_x'}{k_x} \right) \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\vec{k}'_{\parallel}} \int_{q_z} dq_z d^2 \vec{k}'_{\parallel} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{C_{\vec{q}}^2}{V} |I_{mn}(q_z)|^2 \left(N_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \\ &\quad \times \delta \left[E_n(\vec{k}'_{\parallel}) - E_m(\vec{k}_{\parallel}) \pm \hbar \omega_{\vec{q}} \right] \left(1 - \frac{k_x'}{k_x} \right), \end{aligned} \quad (3.5.27)$$

となり、縮退を考慮した場合は

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\tau_{11}(\vec{k}_{\parallel})} &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\vec{k}'_{\parallel}} \int_{q_z} dq_z d^2 \vec{k}'_{\parallel} P(m, \vec{k}_{\parallel} \xrightarrow{\vec{q}} n, \vec{k}'_{\parallel}) \frac{[1 - f_0(\vec{k}'_{\parallel})]}{[1 - f_0(\vec{k}_{\parallel})]} \left(1 - \frac{k_{x'}}{k_x}\right) \\
 &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\vec{k}'_{\parallel}} \int_{q_z} dq_z d^2 \vec{k}'_{\parallel} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{C_{\vec{q}}^2}{V} |I_{mn}(q_z)|^2 \left(N_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right) \\
 &\quad \times \delta \left[E_n(\vec{k}'_{\parallel}) - E_m(\vec{k}_{\parallel}) \pm \hbar \omega_{\vec{q}} \right] \frac{[1 - f_0(\vec{k}'_{\parallel})]}{[1 - f_0(\vec{k}_{\parallel})]} \left(1 - \frac{k_{x'}}{k_x}\right), \quad (3.5.28)
 \end{aligned}$$

となる。記号 \mp は上側はフォノンの吸収を下側はフォノンの放出を表す。

3-6 二次元電子ガスと音響フォノンの相互作用

音響フォノンによる散乱の場合、式 (3.5.2) の C_q は次のように与えられる¹²⁾

$$C_q = \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_q}} q D_{ac}, \quad (3.6.1)$$

ここで ρ は Si の結晶密度、 D_{ac} は音響フォノンの変形ポテンシャルである。フォノンの数 N_q は

$$N_q = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_q/k_B T) - 1}, \quad (3.6.2)$$

で与えられる。音響フォノンの場合

$$\frac{\hbar\omega_q}{k_B T} \ll 1, \quad (3.6.3)$$

となるので

$$N_q \cong N_q + 1 \cong \frac{k_B T}{\hbar\omega_q}, \quad (3.6.4)$$

となり、 s_{ℓ} を音速とすると

$$N_q = \frac{k_B T}{\hbar s_{\ell} q}, \quad (3.6.5)$$

となる。又、 $\hbar\omega_q$ が電子のエネルギーに比べ充分小さいので

$$\begin{aligned}\delta\left[E_n(\vec{k}'_{\parallel}) - E_m(\vec{k}_{\parallel}) + \hbar\omega_q\right] &\cong \delta\left[E_n(\vec{k}'_{\parallel}) - E_m(\vec{k}_{\parallel}) - \hbar\omega_q\right] \\ &\cong \delta\left[E_n(\vec{k}'_{\parallel}) - E_m(\vec{k}_{\parallel})\right],\end{aligned}\quad (3.6.6)$$

とおくことができ、フォノンの吸収項と放出項をたしあわせ、音響フォノンによる散乱確率 $1/\tau_{ac}$ は散乱前後の電子エネルギーの変化が小さいとして式 (3.5.27) を用いて

$$\begin{aligned}\frac{1}{\tau_{ac}} &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\vec{k}'_{\parallel}} \frac{1}{(2\pi)} \int_{q_z} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\hbar}{2\rho s_l q} q^2 D_{ac}^2 \frac{2k_B T}{\hbar s_l q} |I_{mn}(q_z)|^2 \\ &\quad \times \delta\left[E_n(\vec{k}'_{\parallel}) - E_m(\vec{k}_{\parallel})\right] \left(1 - \frac{k_{x'}}{k_x}\right) dq_z d^2 \vec{k}'_{\parallel},\end{aligned}\quad (3.6.7)$$

となり、 q_{\parallel} が消えるので q_z と \vec{k}'_{\parallel} の積分に分けることができ

$$\begin{aligned}\frac{1}{\tau_{ac}} &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{k_B T D_{ac}^2}{\rho s_l^2} \frac{1}{(2\pi)} \int_{q_z} |I_{mn}(q_z)|^2 dq_z \\ &\quad \times \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\vec{k}'_{\parallel}} \delta\left[E_n(\vec{k}'_{\parallel}) - E_m(\vec{k}_{\parallel})\right] \left(1 - \frac{k_{x'}}{k_x}\right) d^2 \vec{k}'_{\parallel},\end{aligned}\quad (3.6.8)$$

となる。 \vec{k}'_{\parallel} の積分項 I は

$$\begin{aligned}I &= \int_{\vec{k}'_{\parallel}} \delta\left[E_n(\vec{k}'_{\parallel}) - E_m(\vec{k}_{\parallel})\right] \left(1 - \frac{k_{x'}}{k_x}\right) d^2 \vec{k}'_{\parallel} \\ &= \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \delta\left[E_n(\vec{k}'_{\parallel}) - E_m(\vec{k}_{\parallel})\right] (1 - \cos\theta) d\theta d\vec{k}'_{\parallel},\end{aligned}\quad (3.6.9)$$

ここで $(1 - k_{x'}/k_x) = (1 - \cos\theta)$ と近似した。 θ は電子の散乱角である。上式の積分項は二次元電子ガスのエネルギーの式 (2.4.10) を用いて

$$I = 2\pi \int_0^{\infty} \delta\left[E_n + \frac{\hbar^2}{2m^{*'}} \vec{k}'_{\parallel}{}^2 - E_m - \frac{\hbar^2}{2m^*} \vec{k}_{\parallel}{}^2\right] \vec{k}'_{\parallel} d\vec{k}'_{\parallel},\quad (3.6.10)$$

となり、ここで D を次のように定義すると

$$D = \frac{m^{*'}}{m^*} \vec{k}_{\parallel}{}^2 + \frac{m^{*'}}{2\hbar^2} (E_m - E_n),\quad (3.6.11)$$

\vec{k}'_{\parallel} の積分項 I は

$$I = 2\pi \int_0^{\infty} \delta \left[\frac{\hbar^2}{2m^{*'}} (\vec{k}'_{\parallel}{}^2 - D) \right] \vec{k}'_{\parallel} d\vec{k}'_{\parallel}, \quad (3.6.12)$$

となる。ここで

$$g(x) = \frac{\hbar^2}{2m^{*'}} (x^2 - D), \quad (3.6.13)$$

とすると、微分関数 $g'(x)$ は

$$g'(x) = \frac{\hbar^2}{2m^{*'}} (2x), \quad (3.6.14)$$

となり、 $x_i = \pm\sqrt{D}$ とすると

$$g(x_i) = 0, \quad (3.6.15)$$

となる。デルタ関数の性質より

$$\delta[g(x_i)] = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{g'(x_i)}, \quad (3.6.16)$$

であるから I は

$$\begin{aligned} I &= 2\pi \int_0^{\infty} \left\{ \frac{\delta(\vec{k}'_{\parallel} - \sqrt{D})}{\frac{\hbar^2}{2m^{*'}} 2\sqrt{D}} + \frac{\delta(\vec{k}'_{\parallel} + \sqrt{D})}{-\frac{\hbar^2}{2m^{*'}} 2\sqrt{D}} \right\} u(D) \vec{k}'_{\parallel} d\vec{k}'_{\parallel} \\ &= 2\pi \frac{2m^{*'}}{\hbar^2} \frac{\sqrt{D}}{2\sqrt{D}} u(D) \\ &= \frac{2\pi m^{*'}}{\hbar^2} u(D), \end{aligned} \quad (3.6.17)$$

となる、ここに $u(D)$ は単位階段関数である。 q_z の積分項は

$$\begin{aligned} \int_{q_z} |I_{mn}(q_z)|^2 dq_z &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int \zeta_n^*(z') \zeta_m(z') e^{-iq_z z'} dz' \right]^* \cdot \left[\int \zeta_n^*(z) \zeta_m(z) e^{-iq_z z} dz \right] dq_z \\ &= \int \int \zeta_n(z') \zeta_m^*(z') \zeta_n^*(z) \zeta_m(z) \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(z'-z)q_z} dq_z \right] dz dz' \\ &= 2\pi \int |\zeta_m(z)|^2 |\zeta_n(z)|^2 dz = \frac{\pi}{b_{mn}}, \end{aligned} \quad (3.6.18)$$

となる。ここで

$$\frac{1}{b_{mn}} = 2 \int |\zeta_m(z)|^2 |\zeta_n(z)|^2 dz, \quad (3.6.19)$$

と定義した。また、式 (3.6.18) の中でフーリエ変換

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(z'-z)q_z} dq_z = 2\pi\delta(z'-z), \quad (3.6.20)$$

を用いている。 b_{mn} は距離の次元を持っており、電子の波動関数の広がりに対応する量と考えられる。音響フォノンによる散乱確率は式 (3.6.8) より

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{ac}} &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{k_B T D_{ac}^2}{\rho s_l^2} \cdot \frac{1}{(2\pi) b_{mn}} \cdot \frac{\pi}{(2\pi)^2} \cdot \frac{1}{\hbar^2} \frac{2\pi m^{*'}}{u(D)} \\ &= \frac{k_B T D_{ac}^2 m^{*'}}{\rho \hbar^3 s_l^2} \cdot \frac{1}{2b_{mn}}, \end{aligned} \quad (3.6.21)$$

となる。ここで、 $m^{*'}$ は散乱後の有効状態密度質量 $m_{d'}$ となるが、音響フォノン散乱の場合一般的に同じバレー内で、また同じサブバンド内散乱となるので $m_{d'}$ を m_d として

$$\frac{1}{\tau_{ac}} = \frac{k_B T D_{ac}^2 m_d}{\rho \hbar^3 s_l^2} \cdot \frac{1}{2b_{mn}}, \quad (3.6.22)$$

となる。

3-7 二次元電子ガスとインターバレーフォノンの相互作用

シリコンやゲルマニウムのように多数バレー構造の伝導帯からなる結晶の場合大きな波数ベクトルのフォノンを介してバレー間を遷移するインターバレーフォノン散乱が重要であることが知られている。この散乱は変形ポテンシャルでよく説明できて、関与するフォノンの周波数を ω_{ij} 、変形ポテンシャルを D_{ij} とし、電子は二次元電子ガスを考慮すると、電子の始状態がバレー i 、サブバンド m 、波数ベクトル \vec{k}_{\parallel} から終状態がバレー j 、サブバンド n 、波数ベクトル \vec{k}'_{\parallel} へ散乱される確率 $1/\tau_{\text{int}}$ が求められる。インターバレーフォノン散乱のように大きいエネルギーのフォノンを介することによって散乱後の電子のエネルギーが大きく変化するときは、縮退の効果が無視できなくなるので、縮退の効果を考慮しない場合とした場合の散乱確率を求める。

3-7-1 縮退を考慮しない場合

インターバレーフォノン散乱の場合式 (3.5.2) の C_q は

$$C_q = \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_{ij}}} D_{ij}, \quad (3.7.1)$$

で与えられる¹²⁾。電子の始状態と終状態のエネルギーをそれぞれ $E_{im}(\vec{k}_{\parallel})$ と $E_{jn}(\vec{k}'_{\parallel})$ とすると

$$E_{im}(\vec{k}_{\parallel}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}_{\parallel}^2}{2m_i^*} + E_{im}, \quad (3.7.2)$$

$$E_{jn}(\vec{k}'_{\parallel}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}'_{\parallel}{}^2}{2m_j^*} + E_{jn}, \quad (3.7.3)$$

と表される。ここで m_i^* と m_j^* はバレー i と j における等方的な有効質量で、 E_{im} と E_{jn} はサブバンド m と n の底のエネルギーである。縮退を考慮しない場合は式 (3.5.27) を用いて散乱確率を求めると

$$\frac{1}{\tau_{\text{int}}} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\hbar D_{ij}^2}{2\rho\omega_{ij}} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\vec{k}'_{\parallel}} \frac{1}{(2\pi)} \int_{q_z} |I_{mn}(q_z)|^2$$

$$\times \delta \left[E_{jn}(\vec{k}'_{\parallel}) - E_{im}(\vec{k}_{\parallel}) \pm \hbar\omega_{ij} \right] \left(N_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \left(1 - \frac{k_{x'}}{k_x} \right) dq_z d^2 \vec{k}'_{\parallel}, \quad (3.7.4)$$

となり、これは音響フォノン散乱の場合と同様 \vec{k}'_{\parallel} に関する積分項と q_z に関する積分項とに分離できて、 q_z に関する積分項は式 (3.6.18) と等しくなり、 \vec{k}'_{\parallel} に関する積分項は

$$I = \int_{\vec{k}'_{\parallel}} \delta \left(\frac{\hbar^2 \vec{k}'_{\parallel}{}^2}{2m_j^*} + E_{jn} - \frac{\hbar^2 \vec{k}_{\parallel}{}^2}{2m_i^*} - E_{im} \pm \hbar\omega_{ij} \right) \left(1 - \frac{k_{x'}}{k_x} \right) d^2 \vec{k}'_{\parallel}, \quad (3.7.5)$$

となる。 D は次のように定義して

$$D = \frac{m_j^*}{m_i^*} \vec{k}_{\parallel}{}^2 + \frac{2m_j^*}{\hbar^2} (E_{im} - E_{jn} \mp \hbar\omega_{ij}), \quad (3.7.6)$$

上式を I の式に代入すると

$$\begin{aligned} I &= \int_{\vec{k}'_{\parallel}} \delta \left[\frac{\hbar^2}{2m_j^*} (\vec{k}'_{\parallel}{}^2 - D) \right] \left(1 - \frac{k_{x'}}{k_x} \right) d^2 \vec{k}'_{\parallel} \\ &= \int_0^{\infty} \delta \left[\frac{\hbar^2}{2m_j^*} (\vec{k}'_{\parallel}{}^2 - D) \right] \vec{k}'_{\parallel} d\vec{k}'_{\parallel} \int_0^{2\pi} (1 - \cos\theta) d\theta, \end{aligned} \quad (3.7.7)$$

となる。 δ に関する積分は音響フォノン散乱で求めたのと同じようにして得られる。よって

$$I = \frac{2\pi m_j^*}{\hbar^2} u(D), \quad (3.7.8)$$

となる。 q_z に関する積分項と \vec{k}'_{\parallel} に関する積分項を式 (3.7.4) に代入するとインターバレーフォノンによる散乱確率は

$$\frac{1}{\tau_{\text{int}}} = \frac{D_{ij}^2 m_j^*}{2\rho \hbar^2 \omega_{ij}} \cdot \frac{1}{2b_{mn}} u(D) \left(N_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right), \quad (3.7.9)$$

となる。ここで、 $u(D)$ は単位階段関数で、 m_j^* は散乱後の有効状態密度質量 $m_{d'}$ となり、さらに等価なバレーが n_v 個有る場合は散乱確率は n_v に比例して

$$\frac{1}{\tau_{\text{int}}} = \frac{n_v D_{ij}^2 m_{d'}}{2\rho \hbar^2 \omega_{ij}} \cdot \frac{1}{2b_{mn}} u(D) \left(N_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right), \quad (3.7.10)$$

となる。符号 \mp (±) の上側はフォノンの吸収、下側は放出を表す。

3-7-2 縮退を考慮した場合

縮退を考慮した場合、遷移確率に $[1 - f_0(\vec{k}'_{\parallel})]/[1 - f_0(\vec{k}_{\parallel})]$ の項が付加されるので散乱確率は式 (3.5.28) を用いて以下のように求まる。

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\tau_{\text{int}}} &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\hbar D_{ij}^2}{2\rho\omega_{ij}} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\vec{k}'_{\parallel}} \frac{1}{(2\pi)} \int_{q_z} |I_{mn}(q_z)|^2 \\
 &\quad \times \delta \left[E_{jn}(\vec{k}'_{\parallel}) - E_{im}(\vec{k}_{\parallel}) \pm \hbar\omega_{ij} \right] \frac{[1 - f_0(\vec{k}'_{\parallel})]}{[1 - f_0(\vec{k}_{\parallel})]} \\
 &\quad \times \left(N_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \left(1 - \frac{k_{x'}}{k_x} \right) dq_z d^2 \vec{k}'_{\parallel} \\
 &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\hbar D_{ij}^2}{2\rho\omega_{ij}} \frac{1}{[1 - f_0(\vec{k}_{\parallel})]} \left(N_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \\
 &\quad \times \frac{1}{(2\pi)} \int_{q_z} |I_{mn}(q_z)|^2 dq_z \times \frac{1}{(2\pi)^2} I, \tag{3.7.11}
 \end{aligned}$$

ここで、 q_z に関する積分は縮退を考慮しない場合と同じとなり、 \vec{k}'_{\parallel} に関する積分項は

$$I = \int_{\vec{k}'_{\parallel}} \delta \left[E_{jn}(\vec{k}'_{\parallel}) - E_{im}(\vec{k}_{\parallel}) \pm \hbar\omega_{ij} \right] (1 - \cos\theta) [1 - f_0(\vec{k}'_{\parallel})] d^2 \vec{k}'_{\parallel}, \tag{3.7.12}$$

となる。式 (3.7.6) のように D を縮退を考慮しない場合と同じ値で定義して計算すると

$$\begin{aligned}
 I &= \int_0^{\infty} \delta \left[\frac{\hbar^2}{2m_j^*} (\vec{k}'_{\parallel}{}^2 - D) \right] (1 - \cos\theta) [1 - f_0(\vec{k}'_{\parallel})] d^2 \vec{k}'_{\parallel} \\
 &= \frac{2\pi m_j^*}{\hbar^2} u(D) \left\{ 1 - f_0[E_{im}(\vec{k}_{\parallel}) \mp \hbar\omega_{ij}] \right\}, \tag{3.7.13}
 \end{aligned}$$

となり、散乱確率は

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\tau_{\text{int}}} &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\hbar D_{ij}^2}{2\rho\omega_{ij}} \left(N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \frac{1}{(2\pi)} \int_{q_z} |I_{mn}(q_z)|^2 \\
 &\quad \times \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{2\pi m_{dj}}{\hbar^2} u(D) \frac{1 - f_0[E_{im}(\vec{k}_{\parallel}) \mp \hbar\omega_{ij}]}{1 - f_0[E_{im}(\vec{k}_{\parallel})]} \\
 &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\hbar D_{ij}^2}{2\rho\omega_{ij}} \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{2\pi m_{dj}}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi) b_{mn}} \left(N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) u(D) \frac{1 - f_0[E_{im}(\vec{k}_{\parallel}) \mp \hbar\omega_{ij}]}{1 - f_0[E_{im}(\vec{k}_{\parallel})]} \\
 &= \frac{D_{ij}^2}{2\hbar^2 \rho\omega_{ij}} \cdot \frac{1}{2b_{mn}} \left(N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) u(D) \frac{1 - f_0[E_{im}(\vec{k}_{\parallel}) \mp \hbar\omega_{ij}]}{1 - f_0[E_{im}(\vec{k}_{\parallel})]}, \tag{3.7.14}
 \end{aligned}$$

となる。

3-8 表面粗さ散乱

MOSFET 素子などの酸化膜-半導体界面における表面粗さが、特に表面電界が強くなってきた場合散乱の原因になると考えられ、理論的にも研究されてきた^{6,13,14})。酸化膜-半導体界面に平行な面を xy 面とし、垂直方向を z 軸とする。界面は、 z 方向に不規則なゆらぎ $\Delta(x, y)$ があるとすると、ポテンシャル $V(z)$ にゆらぎを生じ、このポテンシャルのゆらぎが散乱ポテンシャルとなる。 $\Delta(x, y)$ は小さく、ゆっくり変化すると仮定して摂動ポテンシャルを $\Delta(x, y)$ の一次の項で止めると、表面粗さによる摂動ハミルトニアン H_{sr} は

$$H_{\text{sr}} = -\frac{dV}{dz}\Delta(x, y), \quad (3.8.1)$$

となる。簡単化のために同じサブバンド内の散乱を考えて、電子の始状態の波数ベクトル \vec{k}_{\parallel} 、終状態の波数ベクトル \vec{k}'_{\parallel} とすると行列要素は

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}'_{\parallel} | H_{\text{sr}} | \vec{k}_{\parallel} \rangle &= -\int_{-\infty}^{\infty} \zeta^*(z) \frac{dV}{dz} \zeta(z) dz \frac{1}{A} \int_A \Delta(x, y) e^{i(\vec{k}_{\parallel} - \vec{k}'_{\parallel}) \cdot \vec{r}_{\parallel}} d^2 \vec{r}_{\parallel} \\ &= -F_{\text{eff}} \Delta(\vec{k}_{\parallel} - \vec{k}'_{\parallel}), \end{aligned} \quad (3.8.2)$$

となり、ここで

$$F_{\text{eff}} = \int_{-\infty}^{\infty} \zeta^*(z) \frac{dV}{dz} \zeta(z) dz, \quad (3.8.3)$$

$$\Delta(\vec{Q}) = \frac{1}{A} \int_A \Delta(\vec{r}_{\parallel}) e^{i\vec{Q} \cdot \vec{r}_{\parallel}} d^2 \vec{r}_{\parallel}, \quad (3.8.4)$$

又、 $\vec{Q} = \vec{k}_{\parallel} - \vec{k}'_{\parallel}$ 、 \vec{r}_{\parallel} は xy 面の位置ベクトル、 A は規格化のための面積、 $\zeta(z)$ は電子の包絡関数である。 F_{eff} は Matsumoto and Uemura¹⁴) により次式のように導かれた

$$\begin{aligned} F_{\text{eff}} &= \frac{e^2}{\kappa_{\text{Si}} \epsilon_0} \left(\frac{1}{2} N_s + N_{\text{depl}} \right) \\ &= e E_{\text{eff}}, \end{aligned} \quad (3.8.5)$$

ここで E_{eff} は

$$E_{\text{eff}} = \frac{e}{\kappa_{\text{Si}}\epsilon_0} \left(\frac{1}{2} N_s + N_{\text{depl}} \right), \quad (3.8.6)$$

と表される実効電界で、 N_s は反転電子密度 N_{depl} は空乏層内の空間電荷面密度、 κ_{Si} は Si の比誘電率、 ϵ_0 は真空誘電率である。 $\Delta(\vec{R})$ は自乗平均の高さ因子 Δ と、相関の長さ Λ で表されるような、ガウス分布をしている位置の相関関数によって表されると仮定する

$$\langle \Delta(\vec{R}) \Delta(\vec{R} + \vec{R}_1) \rangle = \Delta^2 e^{-R_1^2/\Lambda^2}, \quad (3.8.7)$$

ここで $\langle \dots \rangle$ 試料平均を表す。このような仮定の下では、 $|\Delta(\vec{Q})|^2$ は次式で与えられる

$$|\Delta(\vec{Q})|^2 = \frac{\pi \Delta^2 \Lambda^2}{A} e^{-Q^2 \Lambda^2/4}, \quad (3.8.8)$$

波数ベクトル \vec{k}_{\parallel} を持つ表面粗さによる散乱確率 $1/\tau_{\text{sr}}(\vec{k}_{\parallel})$ は、式 (3.3.14) を用い、また、散乱前後のエネルギーの変化が小さいとして

$$\frac{1}{\tau_{\text{sr}}(\vec{k}_{\parallel})} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{k}'_{\parallel}} |\langle \vec{k}'_{\parallel} | H_{\text{sr}} | \vec{k}_{\parallel} \rangle|^2 \delta [E(\vec{k}'_{\parallel}) - E(\vec{k}_{\parallel})] \left(1 - \frac{k_{x'}}{k_x} \right), \quad (3.8.9)$$

となる。ここで $(1 - k_{x'}/k_x)$ を $(1 - \cos \theta)$ と近似し、スクリーニング効果を考慮し、 \vec{k}'_{\parallel} に関する和を \vec{Q} に関する和に変換すると、表面粗さによる散乱確率は次のように表される⁶⁾

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{\text{sr}}(\vec{k}_{\parallel})} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{Q}} \left[\frac{\Delta \Lambda e E_{\text{eff}}}{\epsilon(Q)} \right]^2 [\exp(-Q^2 \Lambda^2/4)] \\ &\quad \times \delta [E(\vec{k}_{\parallel} - \vec{Q}) - E(\vec{k}_{\parallel})] (1 - \cos \theta), \end{aligned} \quad (3.8.10)$$

ここで、 $\epsilon(Q)$ はスクリーニング効果を含んだ誘電関数で

$$\epsilon(Q) = 1 + \frac{e^2}{2\kappa_{\text{Si}}\epsilon_0} \frac{1}{Q} \frac{2m_d}{2\pi\hbar^2} F(Q), \quad (3.8.11)$$

と表され、 $F(Q)$ は

$$F(Q) = \int dz \int dz' |\zeta(z)|^2 |\zeta(z')|^2 \exp(-Q|z - z'|), \quad (3.8.12)$$

で与えられる。今回の解析では、スクリーニング効果を無視する。また、Hartstein *et al.*⁷⁾ によると相関長の Λ が約 6 \AA であり、 $k\Lambda \ll 1$ が成立するので表面粗さによる散乱確率は近似的に

$$\frac{1}{\tau_{\text{sr}}} = \pi m_{\text{d}} [\Delta \Lambda e E_{\text{eff}}]^2 / \hbar^3, \quad (3.8.13)$$

で与えられる。ここではサブバンド内散乱を考えており、 m_{d} は散乱後の有効状態密度質量である。

3-9 イオン化不純物散乱

シリコン基板内のイオン化不純物はクーロンポテンシャルを作るので電子はそのポテンシャルにより散乱を受ける。この節ではイオン化不純物散乱に対する 2DEG の散乱確率 $1/\tau_{\text{ion}}$ を導出する。座標は、界面に平行な xy 面内の位置ベクトルを \vec{r}_{\parallel} 、界面に垂直方向を z とする。位置 $(\vec{r}_{\parallel 0}, z_0)$ に $+e$ の点電荷があるとすると、その時の静電ポテンシャル $\phi(\vec{r}_{\parallel}, z)$ は

$$\phi(\vec{r}_{\parallel}, z) = \frac{e}{4\pi\kappa_{\text{Si}}\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{(\vec{r}_{\parallel} - \vec{r}_{\parallel 0})^2 + (z - z_0)^2}}, \quad (3.9.1)$$

となる。ここで $\kappa_{\text{Si}}\epsilon_0$ は Si の誘電率。このポテンシャルによる摂動ハミルトニアン H_{ion} は

$$H_{\text{ion}} = -e\phi, \quad (3.9.2)$$

となり、サブバンド m 、電子の波数ベクトル \vec{k}_{\parallel} にある 2DEG がサブバンド n 、電子の波数ベクトル \vec{k}'_{\parallel} の状態に散乱される場合の行列要素は次のように与えられる

$$\begin{aligned} \langle n, \vec{k}'_{\parallel} | H_{\text{ion}} | m, \vec{k}_{\parallel} \rangle &= -\frac{e^2}{4\pi\kappa_{\text{Si}}\epsilon_0 A} \int \zeta_n^*(z) \zeta_m(z) dz \\ &\times \int \frac{\exp[i(\vec{k}_{\parallel} - \vec{k}'_{\parallel}) \cdot \vec{r}_{\parallel}]}{\sqrt{(\vec{r}_{\parallel} - \vec{r}_{\parallel 0})^2 + (z - z_0)^2}} d^2 \vec{r}_{\parallel}, \end{aligned} \quad (3.9.3)$$

ここで、 $\vec{Q} = \vec{k}_{\parallel} - \vec{k}'_{\parallel}$ および $\vec{r}_{\parallel} - \vec{r}_{\parallel 0} = \vec{r}_{\parallel}$ とおいて行列要素の自乗を求めると

$$|\langle n, \vec{k}'_{\parallel} | H_{\text{ion}} | m, \vec{k}_{\parallel} \rangle|^2 = \left(\frac{e^2}{2\pi\kappa_{\text{Si}}\epsilon_0} \right) \frac{1}{Q^2 A^2} |I_{mn}(Q, z_0)|^2, \quad (3.9.4)$$

となり、ここで $I_{mn}(Q, z_0)$ は

$$I_{mn}(Q, z_0) = \int \zeta_m^*(z) \zeta_n(z) \exp(Q|z - z_0|) dz, \quad (3.9.5)$$

である。2DEG が $(\vec{r}_{\parallel 0}, z_0)$ にある点電荷 $+e$ により $|m, \vec{k}_{\parallel}\rangle$ から $|n, \vec{k}'_{\parallel}\rangle$ へ遷移する確率は

$$P(m, \vec{k}_{\parallel} \rightarrow n, \vec{k}'_{\parallel}; z_0) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n, \vec{k}'_{\parallel} | H_{\text{ion}} | m, \vec{k}_{\parallel} \rangle|^2 \delta[E(\vec{k}'_{\parallel}) - E(\vec{k}_{\parallel})], \quad (3.9.6)$$

ここで、 $E(\vec{k}_{\parallel})$ と $E(\vec{k}'_{\parallel})$ はそれぞれ 2DEG の散乱前後のエネルギーで

$$E(\vec{k}_{\parallel}) = \frac{\hbar k^2}{2m^*} + E_m, \quad (3.9.7)$$

$$E(\vec{k}'_{\parallel}) = \frac{\hbar k'^2}{2m^{*'}} + E_n, \quad (3.9.8)$$

であり、 m^* と $m^{*'}$ はそれぞれ散乱前後の等方的な有効質量である。イオン化不純物濃度が xy 面内に一様で z 方向の面密度が $g_{\text{ion}}(z)$ であるとする式 (3.9.6) の遷移確率は

$$\begin{aligned} P(m, \vec{k}_{\parallel} \rightarrow n, \vec{k}'_{\parallel}) &= A \int P(m, \vec{k}_{\parallel} \rightarrow n, \vec{k}'_{\parallel}; z_0) g_{\text{ion}}(z_0) dz_0 \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{e^2}{2\pi\kappa_{\text{Si}}\epsilon_0} \right) \frac{1}{Q^2 A} J_{mn}(Q) \delta[E(\vec{k}'_{\parallel}) - E(\vec{k}_{\parallel})], \end{aligned} \quad (3.9.9)$$

となり、ここで $J_{mn}(Q)$ は次のように定義される

$$J_{mn}(Q) = \int |I_{mn}(Q, z_0)|^2 g_{\text{ion}}(z_0) dz_0, \quad (3.9.10)$$

イオン化不純物による 2DEG の散乱確率 $1/\tau_{\text{ion}}$ は式 (3.3.22) を用い、散乱前後のエネルギー変化が小さいとすると

$$\frac{1}{\tau_{\text{ion}}} = \sum_n \sum_{\vec{k}'_{\parallel}} P(m, \vec{k}_{\parallel} \rightarrow n, \vec{k}'_{\parallel}) \left(1 - \frac{k'_x}{k_x}\right), \quad (3.9.11)$$

となり、 \vec{k}'_{\parallel} に関する和を積分の形に直し、 $k'_x/k_x = \cos\theta$ と近似すると

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{\text{ion}}} &= \sum_n \int \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{e^2}{2\pi\kappa_{\text{Si}}\epsilon_0} \right) \frac{1}{Q^2 A} J_{mn}(Q) \\ &\times \delta\left(E_n - E_m + \frac{\hbar^2 \vec{k}'_{\parallel}{}^2}{2m^{*'}} - \frac{\hbar^2 \vec{k}_{\parallel}{}^2}{2m^*}\right) (1 - \cos\theta) d^2 \vec{k}'_{\parallel}, \end{aligned} \quad (3.9.12)$$

となり、ここで

$$D = \frac{m^{*'}}{m^*} k^2 - \frac{2m^{*'}}{\hbar^2} (E_n - E_m), \quad (3.9.13)$$

$$Q = \sqrt{(k^2 + D - 2k\sqrt{D}\cos\theta)}, \quad (3.9.14)$$

と定義すると、デルタ関数の性質を利用して

$$\frac{1}{\tau_{\text{ion}}} = \sum_n \left(\frac{m^{*'} e^4}{8\pi\hbar^3 (\kappa_{\text{Si}}\epsilon_0)^2} \right) \int \frac{J_{mn}(Q)}{Q(\theta)^2} (1 - \cos\theta) d\theta u(D), \quad (3.9.15)$$

ここで、 $u(D)$ はエネルギー保存則を表す単位階段関数である。Price^{9,10)} により導出されたスクリーニング効果を考慮した式によると

$$\frac{1}{\tau_{\text{ion}}} = \sum_n \left(\frac{m^{*'} e^4}{8\pi\hbar^3 (\kappa_{\text{Si}}\epsilon_0)^2} \right) \int \frac{J_{mn}(Q(\theta))(1 - \cos\theta)}{[Q(\theta) + PH_{mn}(Q(\theta))]^2} d\theta u(D), \quad (3.9.16)$$

ここで、スクリーニングパラメータ P および H_{mn} は

$$P = e^2 N_s / (2\kappa_{\text{Si}}\epsilon_0 k_B T), \quad (3.9.17)$$

$$H_{mn}(Q(\theta)) = \iint \zeta_m(z_1)\zeta_m(z_2)\zeta_n(z_1)\zeta_n(z_2)\exp(-Q(\theta)|z_1 - z_2|) dz_1 dz_2, \quad (3.9.18)$$

で、 N_s は単位面積当たりの反転電子密度である。

3-10 イオン化不純物の電子による遮蔽効果

2DEG 系においてイオン化不純物が存在する場合のスクリーニング効果について述べると、イオン化不純物の存在によりポテンシャルが $\delta\phi(\vec{r})$ 変化し、このため電子の占有率に変化が生じる。この時サブバンド i におけるサブバンドエネルギー E_i は、

$$\delta E_i(\vec{r}_{\parallel}) = -e\bar{\phi}_i(\vec{r}_{\parallel}) = -e \int_{-\infty}^{\infty} \delta\phi(\vec{r}) |\zeta_i(z)|^2 dz, \quad (3.10.1)$$

だけ変化する。よって、イオン化不純物の存在によって誘起される電荷は

$$\begin{aligned} \rho_{\text{ind}}(\vec{r}) &= -e \sum_i \delta N_i |\zeta_i(z)|^2 = -e \sum_i \frac{\partial N_i}{\partial E_i} \delta E_i |\zeta_i(z)|^2 \\ &= e^2 \sum_i \frac{\partial N_i}{\partial E_i} \bar{\phi}_i(\vec{r}_{\parallel}) |\zeta_i(z)|^2 = -e^2 \sum_i \frac{\partial N_i}{\partial E_F} \bar{\phi}_i(\vec{r}_{\parallel}) |\zeta_i(z)|^2, \end{aligned} \quad (3.10.2)$$

ここで、サブバンド i における電子の占有率 N_i は式 (2.4.16) より

$$N_i = \frac{m_{di} n_{vi} k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left\{ 1 + \exp[(E_F - E_i)/k_B T] \right\}, \quad (3.10.3)$$

で表されから

$$\frac{\partial N_i}{\partial E_F} = \frac{m_{di} n_{vi}}{\pi \hbar^2} \frac{1}{1 + \exp[(E_i - E_F)/k_B T]}, \quad (3.10.4)$$

となり、この式を式 (3.10.2) に代入すると誘起電荷は

$$\rho_{\text{ind}}(\vec{r}) = -2\kappa_{Si}\epsilon_0 \sum_i P_i \bar{\phi}_i(\vec{r}_{\parallel}) |\zeta_i(z)|^2, \quad (3.10.5)$$

ここで、 P_i は次式で定義した。

$$P_i = \frac{e^2}{2\kappa_{Si}\epsilon_0} \frac{m_{di} n_{vi}}{\pi \hbar^2} \frac{1}{1 + \exp[(E_i - E_F)/k_B T]}, \quad (3.10.6)$$

以上より、2DEG によるスクリーニング効果を考慮したポアソン方程式は

$$\nabla^2 \delta\phi(\vec{r}) = -\frac{1}{\kappa_{Si}\epsilon_0} \left[\rho_{\text{ext}}(\vec{r}) + \rho_{\text{ind}}(\vec{r}) \right], \quad (3.10.7)$$

となり、イオン化不純物によるポテンシャル $\delta\phi(\vec{r})$ を $\tilde{\phi}(\vec{r})$ とおいて式 (3.10.5) を (3.10.7) に代入すると

$$\nabla^2 \tilde{\phi}(\vec{r}) - 2 \sum_i P_i |\zeta_i(z)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\phi}(\vec{r}) |\zeta_i(z)|^2 dz = -\frac{1}{\kappa_{Si}\epsilon_0} \rho_{\text{ext}}(\vec{r}), \quad (3.10.8)$$

となる。

正電荷をもつ一個の不純物が $z = z_0$ に存在する場合、外部電荷は

$$\rho_{\text{ext}}(\vec{r}) = e\delta(\vec{r}_{\parallel})\delta(z - z_0), \quad (3.10.9)$$

と表され、これを式 (3.10.8) に代入すると

$$\nabla^2 \tilde{\phi}(\vec{r}) - 2 \sum_i P_i |\zeta_i(z)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\phi}(\vec{r}) |\zeta_i(z)|^2 dz = -\frac{e}{\kappa_{Si}\epsilon_0} \delta(\vec{r}_{\parallel})\delta(z - z_0), \quad (3.10.10)$$

となる。上式の両辺に対し、フーリエ変換

$$\tilde{\Phi}(\vec{Q}, z) = \int \tilde{\Phi}(\vec{r}_{\parallel}, z) e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}_{\parallel}} d^2\vec{r}_{\parallel}, \quad (3.10.11)$$

を行うと

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - Q^2 \right) \tilde{\Phi}(\vec{Q}, z) - 2 \sum_i P_i |\zeta_i(z)|^2 \tilde{\Phi}_i(\vec{Q}) = -\frac{e}{\kappa_{Si}\epsilon_0} \delta(z - z_0), \quad (3.10.12)$$

ここで、

$$\tilde{\Phi}_i(\vec{Q}) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Phi}(\vec{Q}, z) |\zeta_i(z)|^2 dz, \quad (3.10.13)$$

である。また、

$$f(z) = -\frac{e}{\kappa_{Si}\epsilon_0} \delta(z - z_0) + 2 \sum_i P_i |\zeta_i(z)|^2 \tilde{\Phi}_i(\vec{Q}), \quad (3.10.14)$$

とおくと、式 (3.10.12) は

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - Q^2 \right) \tilde{\Phi}(\vec{Q}, z) = f(z), \quad (3.10.15)$$

となり、上式の両辺をフーリエ変換

$$\hat{\psi}(\vec{Q}, q_z) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Phi}(\vec{Q}, z) e^{iq_z z} dz, \quad (3.10.16)$$

$$\hat{f}(q_z) = \int_{-\infty}^{\infty} f(z) e^{q_z z} dz, \quad (3.10.17)$$

を行うと

$$\hat{\psi}(\vec{Q}, q_z) = -\frac{\hat{f}(q_z)}{q_z^2 + Q^2}, \quad (3.10.18)$$

となる。上式の両辺を逆フーリエ変換を行うと、

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}(\vec{Q}, z) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}(\vec{Q}, q_z) e^{-iq_z z} dq_z \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{f}(q_z) e^{-iq_z z}}{q_z^2 + Q^2} dq_z \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(z') dz' \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-iq_z z}}{q_z^2 + Q^2} dq_z \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(z') dz' \times (\pm 2\pi i) \times \frac{e^{-Q|z-z'|}}{(\pm 2iQ)} \\ &= -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-Q|z-z'|}}{2Q} f(z') dz' \\ &= -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-Q|z-z'|}}{2Q} \left[-\frac{e}{\kappa_{Si}\epsilon_0} \delta(z' - z_0) + 2 \sum_i P_i |\zeta_i(z')|^2 \bar{\Phi}_i(\vec{Q}) \right] dz' \\ &= \frac{e}{\kappa_{Si}\epsilon_0} \frac{e^{-Q|z-z_0|}}{2Q} - \sum_i P_i \bar{\Phi}_i(\vec{Q}) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-Q|z-z'|}}{Q} |\zeta_i(z')|^2 dz', \quad (3.10.19) \end{aligned}$$

となる。

始状態がサブバンド m で波数ベクトル \vec{k}_{\parallel} の電子が、スクリーニングを考慮したイオン化不純物により、終状態がサブバンド n 電子の波数ベクトル \vec{k}'_{\parallel} に散乱される場合の行列要素 \tilde{M} は

$$\tilde{M} = \langle n, \vec{k}'_{\parallel} | e\tilde{\phi} | m, \vec{k}_{\parallel} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \zeta_n^*(z) \zeta_m(z) dz \cdot \frac{e}{A} \int_A \tilde{\phi}(\vec{r}) e^{i(\vec{k}_{\parallel} - \vec{k}'_{\parallel}) \cdot \vec{r}_{\parallel}} d^2 \vec{r}_{\parallel}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{e}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \zeta_n^*(z) \zeta_m(z) \tilde{\Phi}(\vec{Q}, z) dz \quad (\vec{Q} = \vec{k}_{\parallel} - \vec{k}'_{\parallel}) \\
&= \frac{e^2}{2\kappa_{Si}\epsilon_0 QA} \int_{-\infty}^{\infty} \zeta_n^*(z) \zeta_m(z) e^{-Q|z-z_0|} dz \\
&\quad - \sum_i \frac{e}{A} P_i \tilde{\Phi}_i(\vec{Q}) \frac{1}{Q} \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' \zeta_n^*(z) \zeta_m(z) |\zeta_i(z')|^2 e^{-Q|z-z'|} \\
&= \langle n, \vec{k}'_{\parallel} | e\phi | m, \vec{k}_{\parallel} \rangle - \sum_i P_i \langle i, \vec{k}'_{\parallel} | e\tilde{\phi} | i, \vec{k}_{\parallel} \rangle \left[H_{mn}^i(Q)/Q \right], \quad (3.10.20)
\end{aligned}$$

ここで、

$$M = \langle n, \vec{k}'_{\parallel} | e\phi | m, \vec{k}_{\parallel} \rangle, \quad (3.10.21)$$

$$\tilde{M} = \langle n, \vec{k}'_{\parallel} | e\tilde{\phi} | m, \vec{k}_{\parallel} \rangle, \quad (3.10.22)$$

$$H_{mn}^i(Q) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' \zeta_n^*(z) \zeta_m(z) |\zeta_i(z')|^2 e^{-Q|z-z'|}, \quad (3.10.23)$$

とする。 ϕ 、 M は 2DEG によるスクリーニングが無いときのポテンシャルと行列要素である。スクリーニングを考慮した場合の行列要素 \tilde{M} は上式の定義を用いると式 (3.10.20) より

$$\tilde{M} = M - P\tilde{M}(H_{mn}^i/Q), \quad (3.10.24)$$

$$\tilde{M} = \frac{Q}{Q + PH_{mn}^i} M, \quad (3.10.25)$$

となる。

3-11 結言

Si 反転層内に閉じ込められた二次元電子ガス系において、ボルツマン輸送方程式から出発し、散乱緩和時間近似を仮定して得られた分布関数を用いて電流密度を求める方法について述べた。これより 2DEG の移動度を求める式を導いた。また、二次元電子ガスと音響フォノン、インターバレーフォノン、表面粗さ、およびスクリーニングを考慮したイオン化不純物との相互作用による散乱確率を考察し、さらに、インターバレーフォノン散乱の場合、縮退を考慮した散乱確率と散乱緩和時間のエネルギー平均値の式も示した。その結果次の知見を得た。

- 1) 二次元電子ガスと三次元フォノンとの相互作用による散乱確率は電子の閉じ込め量に相当する b_{mn} に反比例する。
- 2) 縮退を考慮した場合、単位時間当たりの遷移確率に $[1 - f_0(\vec{k}'_{\parallel})]/[1 - f_0(\vec{k}_{\parallel})]$ の因子を入れる必要がある。
- 3) 表面粗さ散乱において近似的に求めた散乱確率の式はエネルギーに依存せず、実効電界の自乗に比例する。

本章の参考文献

- 1) S. Kawaji : J. Phys. Soc. Jpn. **27** (1969) 906.
- 2) H. Ezawa, S. Kawaji and K. Nakamura : Jpn. J. Appl. Phys.
13 (1974) 126.
- 3) B. K. Ridley : J. Phys. C **15** (1982) 5899.
- 4) P. J. Price : Ann. Phys. **133** (1981) 217.
- 5) D. K. Ferry : Surf. Sci. **57** (1976) 218.
- 6) T. Ando, A. B. Fowler and F. Stern : Rev. Mod. Phys. **54** (1982) 437.
- 7) A. Hartstein, T. H. Ning and A. B. Fowler : Surf. Sci. **58** (1976) 178.
- 8) F. Stern and W. E. Howard : Phys. Rev. **163** (1967) 816.
- 9) P. J. Price : J. Vac. Sci. & Technol. **19** (1981) 599.
- 10) P. J. Price : Surf. Sci. **113** (1982) 199.
- 11) 阿部龍蔵 : 電気伝導, 培風館 (1969).
- 12) 浜口智尋 : 個体物性 (下), 丸善 (1976).
- 13) T. Ando : J. Phys. Soc. Jpn. **43**(1977)1616.
- 14) Y. Matsumoto and Y. Uemura : *Proc. 6th Int. Vacuum Congress,*
and 2nd Int. Conf. on Solid Surfaces, Kyoto, 1974, Jpn. J. Appl. Phys.
13(1974) Suppl. **2**, Pt. **2**, p. 367.

第4章 Si 反転層内移動度

4-1 緒言

Si 反転層内移動度を測定する方法としてホール効果を用いる方法とコンダクタンス法があり、コンダクタンス法で測定した移動度の表現には電界効果移動度と実効移動度がある。ホール効果により測定されるホール移動度 μ_H と反転電子密度 N_s は次の式で与えられる

$$\mu_H = \frac{\ell V_H h(L/W)}{W V_p B}, \quad (4.1.1)$$

$$N_s = \frac{I_d B}{e V_H}, \quad (4.1.2)$$

ここで、 V_H はホール電圧、 V_p は抵抗端子間電圧、 ℓ 抵抗端子間距離、 W は試料の幅、 L はソース・ドレイン間の長さ、 $h(L/W)$ は試料の形状による補正因子¹⁾、 B は磁場の強さで試料の面に垂直に印加し、 I_d はドレイン電流、 e は電子の電荷量である。

ホール移動度 μ_H はドリフト移動度 μ_{drift} と

$$\mu_H = \gamma_H \mu_{\text{drift}}, \quad (4.1.3)$$

の関係にある。 γ_H はホール因子で電子の散乱過程に依存する。ホール移動度の測定にはホール起電圧を測定する端子と抵抗端子が必要となり試料形状が複雑となることや、試料の形状による補正、散乱機構による補正が必要となる。

コンダクタンス法による電界効果移動度 μ_{FE} は、ドレイン電流のゲート電圧依存性に注目して求めるもので、次の式で定義される。

$$\mu_{\text{FE}} = \left(\frac{\partial I_d}{\partial V_g} \Big|_{V_d} \right) \left(\frac{L}{W} \right) \frac{1}{C_{\text{ox}} V_d}, \quad (4.1.4)$$

ここで、 C_{ox} は単位面積当たりの酸化膜容量、 V_g ゲート電圧、 V_d ソース・ドレイン電圧、 $(\partial I_d / \partial V_g)|_{V_d}$ は相互コンダクタンスである。実効移動度 μ_{eff} は、ドレイン電流のドレイン電圧依存性に注目して定義されたもので、次式で与えられる。

$$\mu_{eff} = \frac{L I_d}{W V_d e N_s}, \quad (4.1.5)$$

反転電子密度 N_s は次のように与えられる。

$$N_s = C_{ox}(V_g - V_{th})/e, \quad (4.1.6)$$

ここで、 V_{th} はしきい値電圧、 I_d/V_d はチャネルコンダクタンス（ドレインコンダクタンス）である²⁾。電界効果移動度 μ_{FE} はディメンジョンは実効移動度と同じであるが、実質的な移動度を意味していない。しかし、式中の $\partial I_d / \partial V_g$ はドレイン電流ーゲート電圧特性の微分係数を表しているのでドレイン電流の変化を論じる場合に利点がある。コンダクタンス法で実効移動度を測定する場合には、ドレイン電流から求めるためキャリア密度の正確な評価が必要となる。

Fang と Fowler³⁾ は上記に述べた Si 反転層内におけるホール移動度、電界効果移動度、および実効移動度の測定を、結晶面方位や基板抵抗率の異なる試料を用い、4.2 ~ 300 K の温度範囲における電子移動度の反転電子密度依存性を報告している。この中で、高温領域ではフォノンによる散乱が支配的で、低温領域ではクーロン散乱が支配的とし、移動度の理論的解析には二次元電子ガスモデルの重要性を指摘している。Sato *et al.*⁴⁾ は電界効果移動度の結晶面方位と電流方向依存性は、量子化された二次元電子ガスによる電子の有効質量の異方性で説明できることを示した。また、電界効果移動度の測定は Si 反転層内の応力効果の研究⁵⁻⁷⁾ にも用いられてきた。Sun と Plummer⁸⁾ は MOSFET のデバイスモデリングには実効移動度が有効であることを指摘し、Si MOSFET の作製条件と電気的条件に対する多くの実験結果を報告している。

本章では、まず移動度の信頼性を検討するために、同一の MOSFET 素子を用いて原理の異なるホール移動度と実効移動度の測定結果を比較検討する。その結果、両者ともほぼ同じ値を与えたので、低温から室温における反転電子密度依存性の測定には実効移動度測定法を用いた。

4-2 実験と結果

測定に用いた試料は、基板不純物濃度が $N_A = 8 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ の (100) Si ウエハに作成された n チャネル MOSFET でゲート長と幅がそれぞれ $L=200\mu\text{m}$ と $W=100\mu\text{m}$ 、電流方向は $\langle 110 \rangle$ 、酸化膜厚 T_{ox} は 25nm である。同一の試料でホール効果の測定も行なえるように、素子の形状はホール端子と抵抗端子が $50\mu\text{m}$ 毎に並んだ図 4.1 に示すようになっている。ホール移動度と実効移動度の比較は、ソース・ドレイン電圧 $V_d=50\text{mV}$ 一定の線形領域で、試料温度は室温と液体窒素温度で行なった。ホール移動度の測定には $B = 0.15\text{T}$ の磁場を試料の面に垂直に印加した。

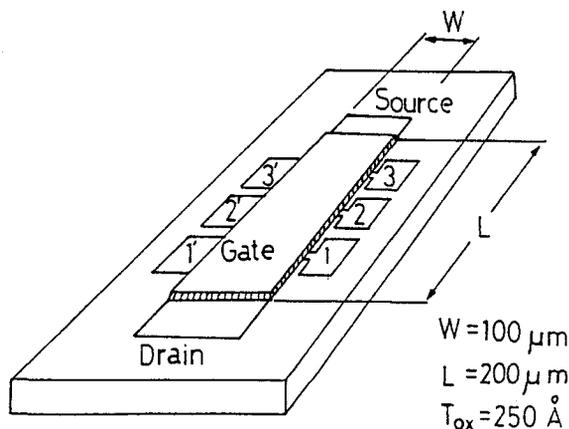


図 4.1 ホール移動度と実効移動度を測定した MOSFET の試料の形状。

図 4.2 に室温と液体窒素温度におけるホール移動度と実効移動度の反転電子密度依存性を示す。図 4.2 の白丸はホール移動度を黒丸は実効移動度を示す。室温ではホール移動度と実効移動度がよく一致したので室温における実効移動度を示す黒丸は省略した。また、室温においてゲート電圧に対して表面に誘起された反転電子密度はホール効果とコンダクタンス法とで 3% 以内で一致したので式 (4.1.1) における形状効果による補正因子 $h(L/W)$ は 1 とする。液体窒素温度においては低電子密度領域で実効移動度がホール移動度より高くなっている。この差異は散乱機構に依存するホール因子 γ_H で説明することはできない。ホール移動度とドリフト移動度はホール因子によって式 (4.1.3) のように表される。ホール因子は音響フォノン散乱に対し 1.18 でイオン化不純物散乱に対し 1.93⁹⁾ となるので、この式からでは液体窒素温度においてホール移動度がドリフト移動度より高くなることになり実験結果を説明することができない。ホール効果とコンダクタンス法の実験結果より低温における一部を除いてホール移動度と実効移動度が一致し、通常 MOSFET の電気的特性の評価にはコンダクタンス法が用いられているので、以後の移動度の温度依存性測定にはコンダクタンス法を用いて、実効移動度を求める。

低温から室温における移動度の反転電子密度依存性を測定するために、低温から室温まで任意の温度が得られる小型極低温冷凍機を用い、 $V_g - I_d$ 特性の測定にはパラメータアナライザを用いた。図 4.3 に 15 - 300 K における実効移動度の反転電子密度依存性を示す。図 4.3 より高温領域では移動度は反転電子密度にたいし単調に低下し、低温領域では一度移動度は上昇してから急激に低下している。図 4.3 の測定結果を図 4.4 の温度依存性に書き直した。図 4.4 の番号は反転電子密度を表し、それぞれ、(1) $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 、(2) $3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 、(3) $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 、(4) $7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ である。図 4.4 に見られるように 100 K より低い温度では移動度は大きくばらつくが 100 K より高温側では収束している。

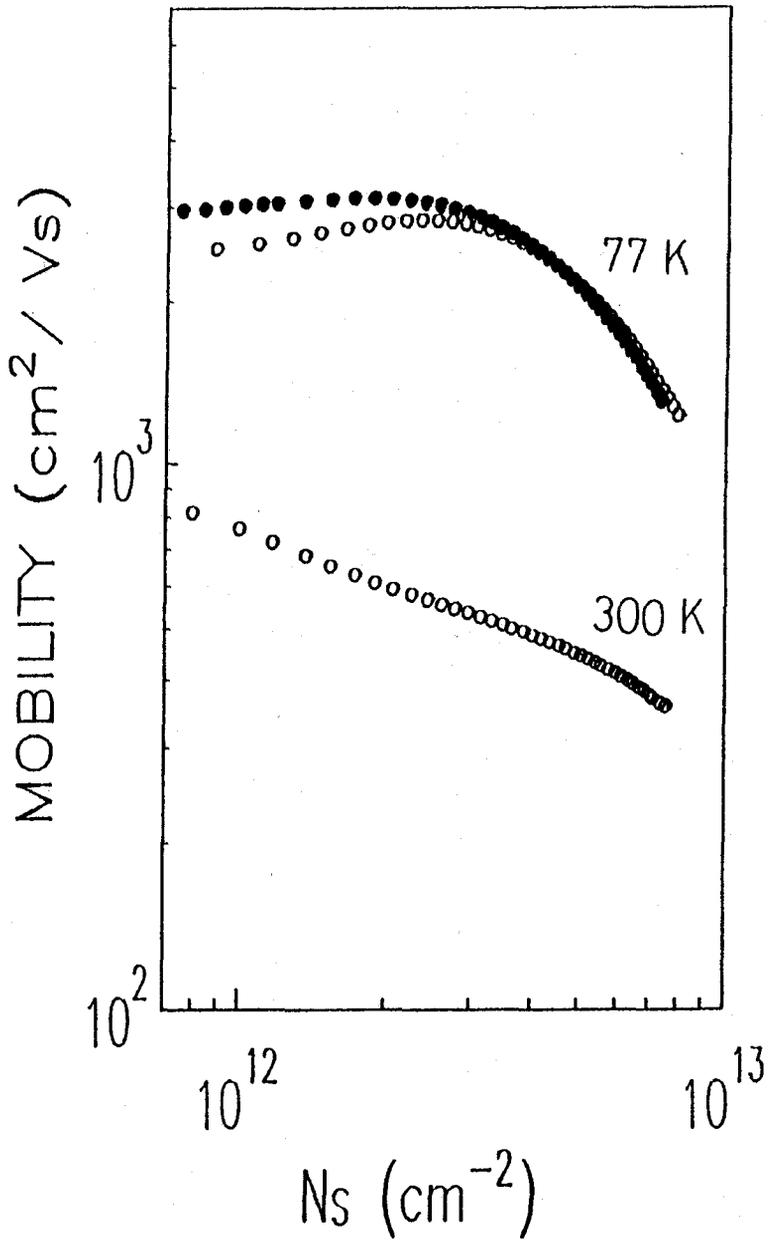


図 4.2. 液体窒素温度と室温におけるホール移動度 (○) と実効移動度 (●) の反転電子密度依存性。

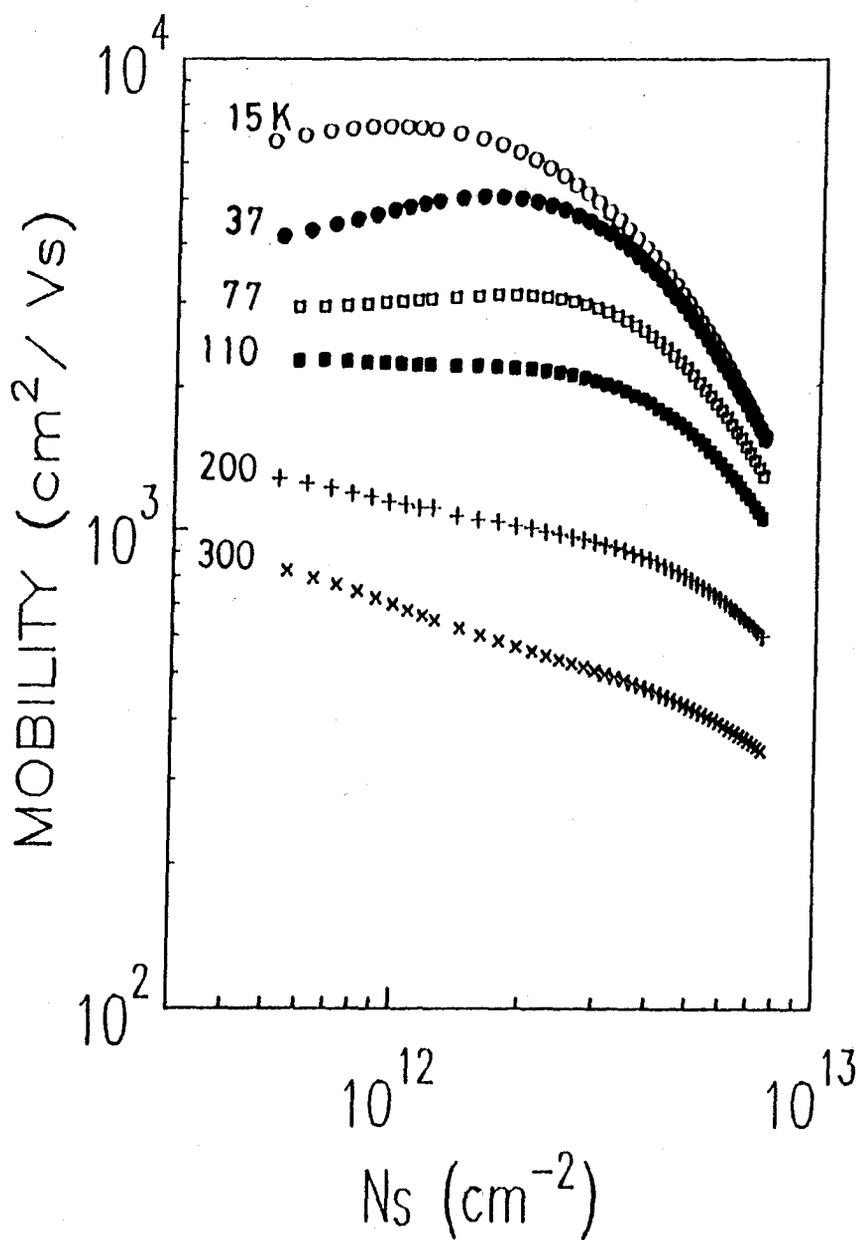


図 4.3 15 ~ 300 K における実効移動度の反転電子密度依存性。

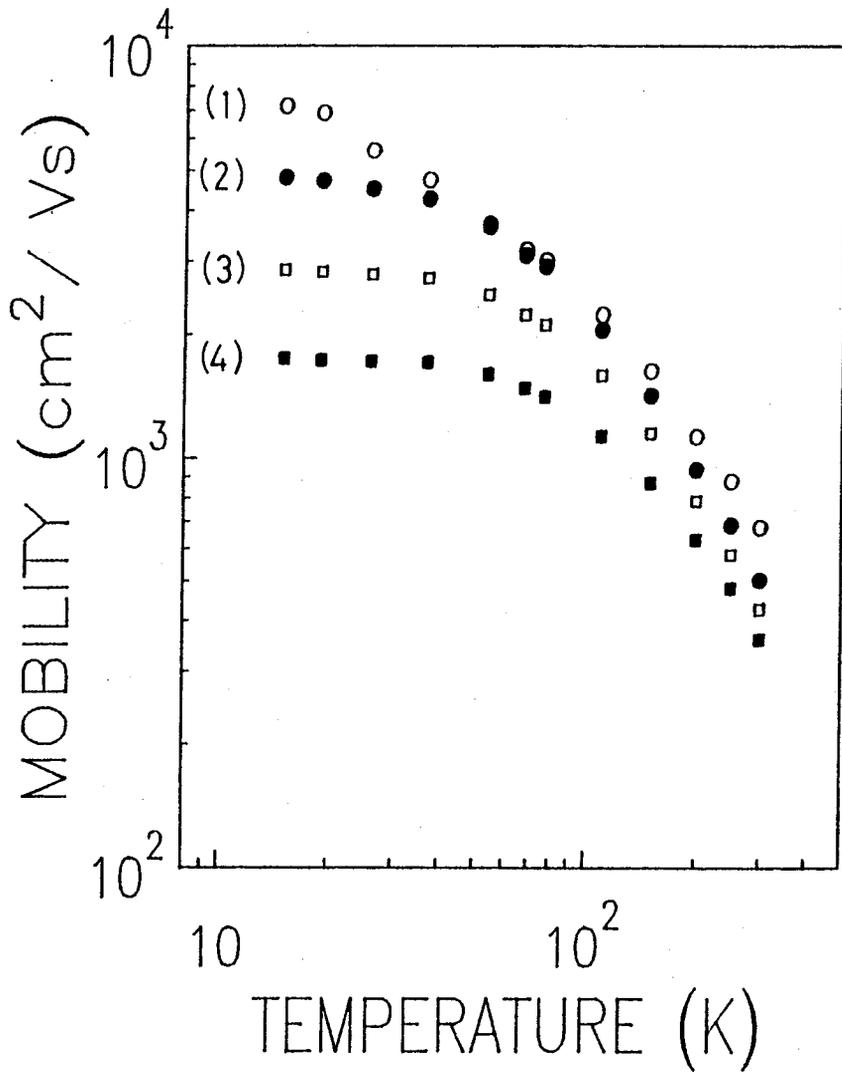


図 4.4 さまざまな反転電子密度に対する実効移動度の温度依存性。図中の番号は (1) $N_s = 1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ 、(2) $N_s = 3 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ 、(3) $N_s = 5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ 、(4) $N_s = 7 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ 。

4-3 検討

Si 反転層内の実効移動度は実効電界で表したとき、基板不純物濃度や基板バイアス電圧に関係無く一つのユニバーサル曲線に乗ることが Sabnis と Clemens¹⁰⁾ 示され、Takagi *et al.*¹¹⁾ は広い不純物濃度範囲 $10^{15} \sim 10^{18} \text{cm}^{-3}$ で成り立つことを報告している。実効電界 E_{eff} は次のように定義される。

$$E_{\text{eff}} = e(\eta N_s + N_{\text{depl}}) / \kappa_{\text{Si}} \epsilon_0, \quad (4.3.1)$$

ここで N_{depl} は空間電荷面密度、 κ_{Si} は Si の比誘電率、 ϵ_0 は真空中の誘電率、 η は実効電界を決めるパラメータであり、ここでは $\eta = 0.5$ とす。図 4.3 の結果を実効電界を用いて表したものが図 4.5 である。図 4.5 の破線は E_{eff}^{-2} 特性を表す。低温における高電界の領域で実効移動度が E_{eff}^{-2} 特性を持つのは式 (3.8.10) または (3.8.13) より明かなように表面粗さ散乱によるもので、低温において低実効電界（低電子密度）領域で移動度の上昇するのは電子のスクリーニング効果を考慮したクーロン散乱により説明される（第 5 章参照）。一方、高温においてはフォノンによる散乱が効くことがよく知られている。図 4.4 の移動度の温度依存性において 100 K より高温側で $\mu_{\text{eff}} \propto T^{-n} (n > 1)$ となっている。これは Fang と Fowler³⁾ や Kotera *et al.*¹²⁾ の実験結果と一致している。二次元電子ガスと音響フォノンとの相互作用の理論によると^{13,14)} 移動度は T^{-1} で音響フォノン散乱のみでは説明できない。バルク Si において Herring¹⁵⁾ や Long¹⁶⁾ はインターバレーフォノンによる散乱を考慮することにより温度依存性が説明できることを示している。以上の実験結果からの検討より、音響フォノン、インターバレーフォノン、表面粗さ、およびスクリーニングされたクーロンポテンシャルによる四つの散乱機構と有効質量の異方性、多数バレー構造、および量子化された電子を考慮した Si 反転層内における電子移動度の解析が必要であることが分かる。その解析方法については次章で述べる。

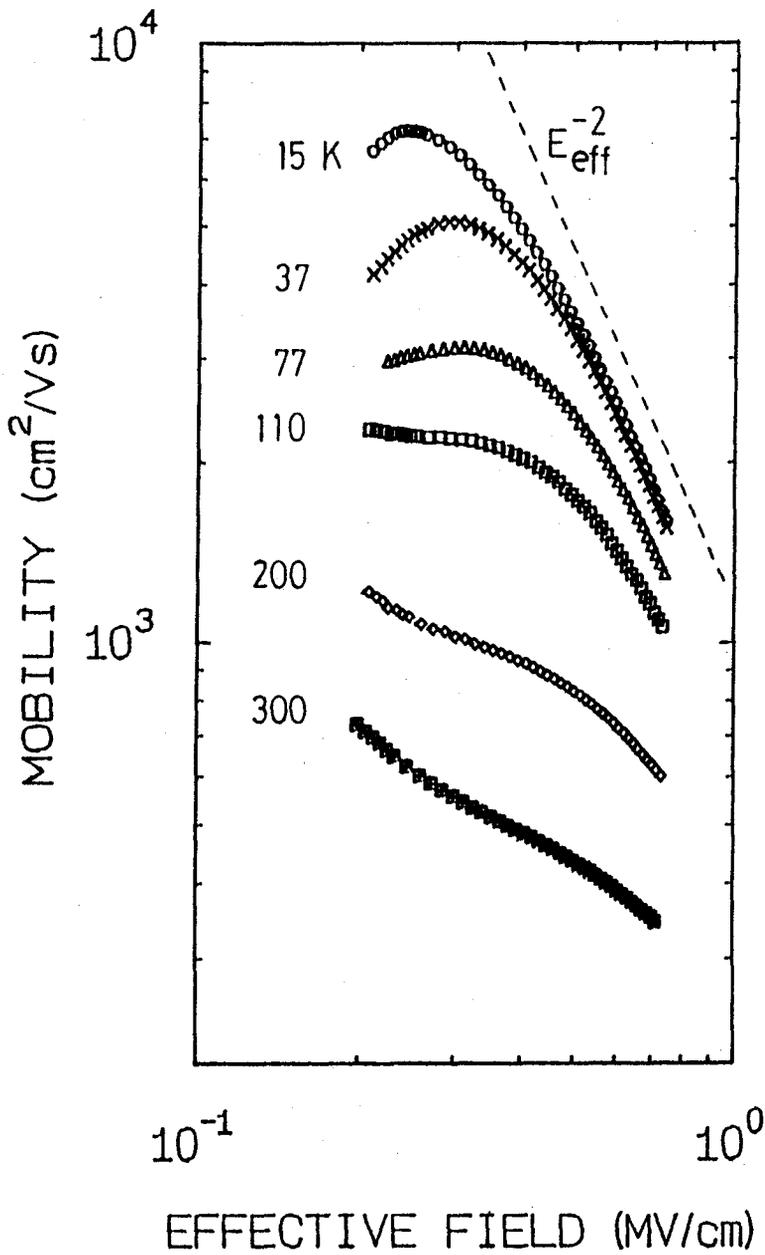


図 4.5 15 ~ 300 K における実効移動度の実効電界依存性、破線は E_{eff}^{-2} 依存性を示す。

4-4 結言

本章では、Si 反転層内における移動度の測定を行った。その結果、

- 1) 室温と液体窒素温度において、同一の試料を用いて測定したホール移動度と実効移動度は、液体窒素温度の低電子密度領域では少しの差異が見られたが全体的によく一致した結果が得られた。
- 2) 15 ~ 300 K の温度範囲における実効移動度の実効電界依存性から主な散乱機構は、音響フォノン、インターバレーフォノン、表面粗さ、およびスクリーニングされたクーロンポテンシャルによる散乱である。

本章の参考文献

- 1) R. F. Wick : J. Appl. Phys. **25** (1954) 741.
- 2) S. M. Sze : *Physics of Semiconductor Devices*,
(Wiley-Interscience, New York, 1969) p505.
- 3) F. F. Fang and A. B. Fowler : Phys. Rev. **169** (1968) 619.
- 4) T. Sato, Y. Takeishi, H. Hara and Y. Okamoto : Phys. Rev. **B4** (1971) 1950.
- 5) H. Gesch, I. Eisele and G. Dorda : Surf. Sci. **73** (1978) 81.
- 6) I. Eisele : Surf. Sci. **73** (1978) 315.
- 7) A. Kastalsky and F. F. Fang : Surf. Sci. **113** (1982) 153.
- 8) S. C. Sun and J. D. Plummer : IEEE Trans. Electron Devices **ED-27** (1980) 1497.
- 9) K. Seeger : *Semiconductor Physics*, (Springer-Verlag, Wien, 1973).
- 10) A. G. Sabnis and J. T. Clemens : *Int. Electron Device Meet. Tech. Dig.*
(IEEE, New York, 1979) p18.
- 11) S. Takagi, M. Iwase and A. Toriumi : *Int. Electron Device Meet. Tech. Dig.*
(IEEE, New York, 1988) p398.
- 12) N. Kotera, Y. Katayama, I. Yoshida and F. Komatsubara :
J. Vac. Sci. & Technol. **9** (1972) 754.
- 13) S. Kawaji : J. Phys. Soc. Jpn. **27** (1969) 906.
- 14) H. Ezawa, S. Kawaji and K. Nakamura : Jpn. J. Appl. Phys. **13** (1974) 126.
- 15) C. Herring : Bell Syst. Tech. J. **34** (1955) 237.
- 16) D. Long : Phys. Rev. **120** (1960) 2024.

第 5 章 Si 反転層内における電子移動度の理論的解析

5-1 緒言

本章では、4 章で述べた Si 反転層内における電子の実効電界（垂直電界）依存性と温度依存性の実験結果について、狭いポテンシャル井戸に閉じ込められた電子と四つの主な散乱因子、即ち音響フォノン、インターバレーフォノン、表面粗さ、およびイオン化不純物との相互作用に基づいたモデルを用いて理論的解析を行う。また、解析においてバルク Si の多数バレー構造と有効質量の異方性、および、インターバレーフォノン散乱では Brunetti *et al.*¹⁾ がバルク Si におけるホットエレクトロンのモンテカルロシミュレーションから求めた三種類の g タイプと三種類の f タイプのフォノンモードを考慮した。

二次元電子ガスの有効状態密度関数は式 (2.4.15) で示されるようにエネルギーに依存しない。また、音響フォノンによる散乱確率と近似的に導かれた表面粗さによる散乱確率はエネルギーに依存せず、インターバレーフォノンによる散乱確率はエネルギーに対しステップ関数的となる。このような二次元電子ガスの特徴よりマックスウェル-ボルツマン分布関数を用いた散乱緩和時間のエネルギー平均値は解析的にかつ厳密に解くことができることを示す。

このようにして得られた移動度の解析式に、Schrödinger 方程式と Poisson 方程式を自己無撞着に解いて得られたサブバンドエネルギー、電子占有率、電子の閉じ込め量などの値を代入して得られた計算結果が Si 反転層内における電子移動度の実効電界依存性²⁾ と温度依存性³⁾ の実験結果をよく説明できることを示す。

低温領域や室温においても実効電界が 0.5 MV/cm 付近より強くなると、縮退の効果が効いてくることが指摘されているが⁴⁾、縮退の効果を考慮した場合の室温における移動度の実効電界依存性についても述べる。

5-2 二次元電子ガス移動度の解析式の導出

バルク Si の伝導帯はブリルアンゾーンの $\langle 100 \rangle$ 方向の X 点付近に六個のバレーからできており、その等エネルギー面は横方向の有効質量が $m_t = 0.19m_0$ で縦方向の有効質量が $m_l = 0.916m_0$ の回転楕円体をしている。(100) Si 表面の反転層においては界面に垂直方向の有効質量 m_3 の値に応じて六個のバレーは二種類のサブバンドを形成する。式 (2.5.6) に示すように、サブバンドエネルギーの値は $m_3^{-1/3}$ に比例するので、 $m_3 = m_l$ の二個のバレーはサブバンドエネルギー E_0, E_1, E_2, \dots で $m_3 = m_t$ の四個のバレーはサブバンドエネルギー $E_{0'}, E_{1'}, E_{2'}, \dots$ となる。これらのサブバンドエネルギーの記号は Stern⁵⁾ のものを用いており、その様子を図 5.1 に示した。

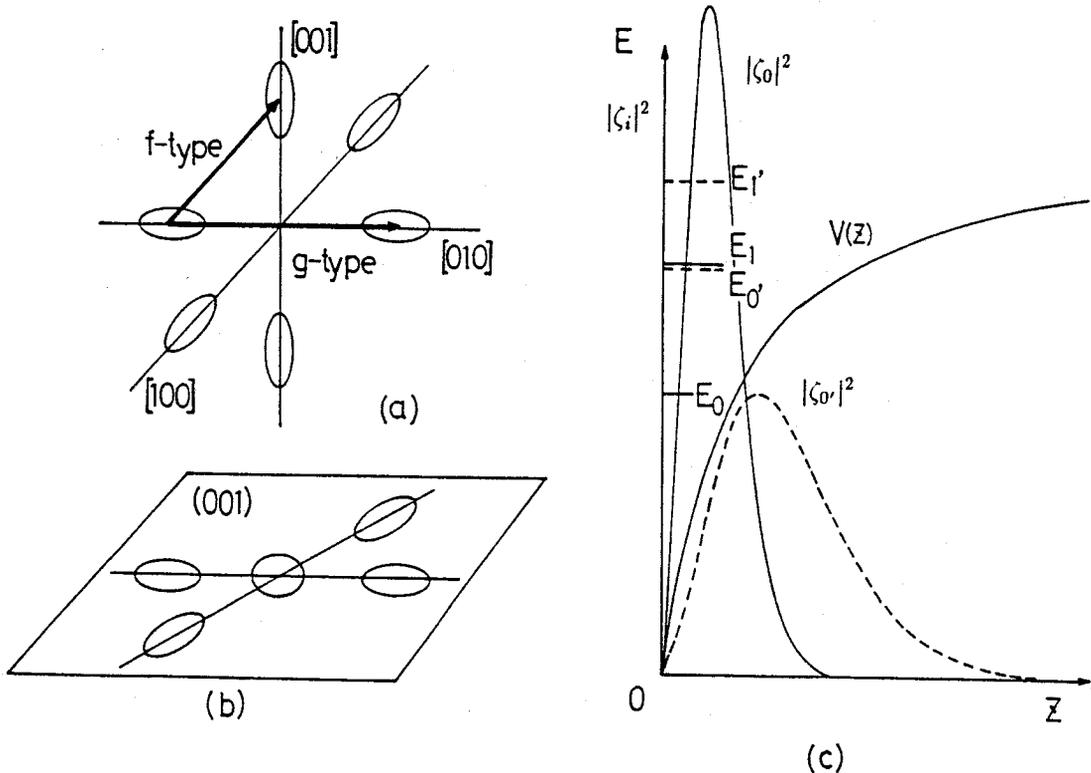


図 5.1 (a) バルク Si 伝導帯の六個の等価楕円体、(b) (001) 面への投影図、(c) 二次元電子ガスの二つの組のサブバンドのエネルギーと電子の波動関数の自乗 ($|\zeta_i(z)|^2$)。

2DEG の電子状態のサブバンドエネルギー、波動関数、電子占有率などは 2 章で述べたように Schrödinger 方程式と Poisson 方程式を自己無撞着に解くことにより得られる

$$-\frac{\hbar^2}{2m_3} \frac{d^2}{dz^2} \zeta_i(z) - e\phi(z)\zeta_i(z) = E_i \zeta_i(z), \quad (5.2.1)$$

$$\frac{d^2\phi}{dz^2} = -\frac{1}{\kappa_{\text{Si}}\epsilon_0} \left[\rho_{\text{depl}}(z) - e \sum N_i \zeta_i^2(z) \right]. \quad (5.2.2)$$

図 5.2 に計算機を用いた数値計算より得られた各サブバンドにおける電子占有率を表面電界の強さの関数で示す。図中の実線は総電子数、破線は液体窒素温度、一点鎖線は室温における電子占有率を表す。計算条件は不純物濃度が $N_A = 8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ の (100) Si 反転層である。この計算結果から室温においても総電子数の 85 % 以上の電子がエネルギーの低い二つのサブバンド E_0 と $E_{0'}$ を占有していることがわかる。温度が低くなるとこの二つのサブバンドの電子占有率はより高くなるので、移動度の解析にはこれら二つのサブバンドを考慮する。

高温領域では主に音響フォノン、インターバレーフォノンおよび表面粗さによる散乱が効くので、先ずこれらの散乱による移動度を求めるが、ここで、インターサブバンド散乱には音響フォノンとインターバレーフォノンによるものがあるが、音響フォノンのエネルギーは電子のエネルギーに比べて十分小さいので、音響フォノンによるインターサブバンド散乱は無視する、又、インターバレーフォノンによる散乱では Brunetti *et al.*¹⁾ はホットエレクトロンのモンテカルロシミュレーションから、ホットエレクトロンの輸送現象を説明するためには表 5.1 に示すように、三種類の f タイプと三種類の g タイプのインターバレーフォノンモードが必要であることを示した。実際の移動度を求める計算ではこれらの三種類の f および g タイプのフォノンモードを考慮するが、計算式が複雑となるので、次に示す計算においてはエネルギー $\hbar\omega_{f_i}$ を持つ f タイプインターバレーフォノンとエネルギー $\hbar\omega_{g_i}$ を持つ g タイプインターバレーフォノンの二つフォノンモードとする。従って、これらの和を

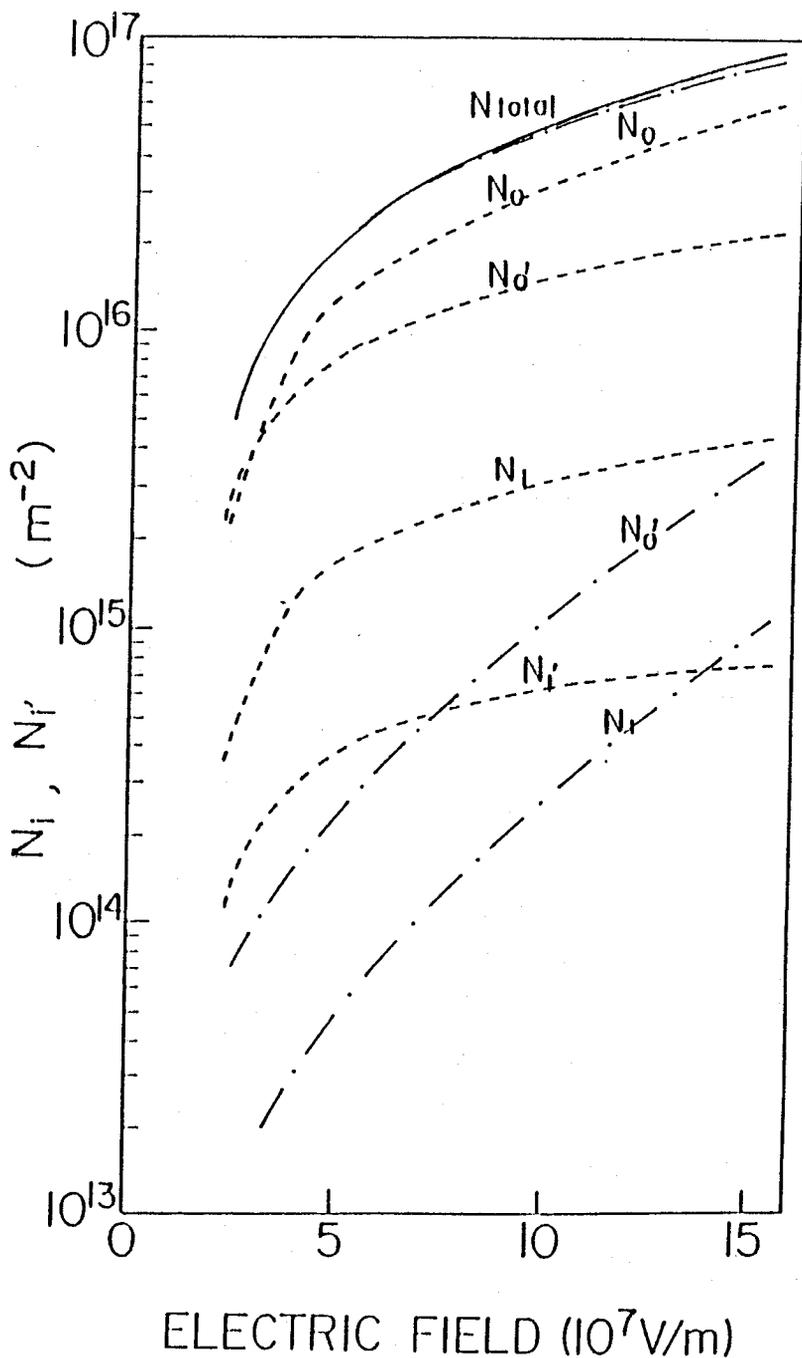


図 5.2 基板不純物濃度が $N_A = 8 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ の (100) Si 反転層におけるサブバンド $E_{0(1)}$ と $E_{0'(1')}$ の電子の占有率 $N_{0(1)}$ と $N_{0'(1')}$ で、破線は室温の電子占有率を、一点鎖線は液体窒素温度の電子占有率を表面電界依存性として示す。実線は総電子数 N_{total} を示す。

表 5.1 インターバレーフォノン散乱のパラメータ
(Brunetti *et al.* ¹⁾)。

インターバレー 散乱の種類	T (K)	D_j (10^8eV/cm)
$f1$	220	0.3
$f2$	550	2.0
$f3$	685	2.0
$g1$	140	0.50
$g2$	215	0.80
$g3$	720	11.0

それぞれについて考えれば全てのインターバレーフォノン散乱を考慮した解析的式が得られる。表面粗さ散乱については近似的に得られた式 (3.8.13) を用いる。

これらの仮定のもとでサブバンド E_0 における電子に対する散乱確率は

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{\text{ps}}} = & (A_0 + B_0)u(E) + C_{0gi}[N_{gi}u(E) + (N_{gi} + 1)u(E - \hbar\omega_{gi})] \\ & + 4C_{ofi}[N_{fi}u(E - \Delta E + \hbar\omega_{fi}) \\ & + (N_{fi} + 1)u(E - \Delta E - \hbar\omega_{fi})], \end{aligned} \quad (5.2.3)$$

また、サブバンド $E_{0'}$ の電子に対する散乱確率は

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{\text{ps}'}} = & (A_{0'} + B_{0'})u(E) + C_{0'gi}[N_{gi}u(E) + (N_{gi} + 1)u(E - \hbar\omega_{gi})] \\ & + 2C_{ofi}[N_{fi}u(E) + (N_{fi} + 1)u(E - \hbar\omega_{fi})] \\ & + 2C'_{ofi}[N_{fi}u(E) + (N_{fi} + 1)u(E + \Delta E - \hbar\omega_{fi})], \end{aligned} \quad (5.2.4)$$

となり、各係数は次のように表される。

$$A_0 = \frac{m_d D_{ac}^2 k_B T}{\hbar^3 \rho s_l^2} \frac{1}{2b_{00}}, \quad (5.2.5a)$$

$$B_0 = \pi m_d (\Delta \Lambda e E_{\text{eff}})^2 / \hbar^3, \quad (5.2.5b)$$

$$C_{0gi} = \frac{m_d D_{gi}^2}{2\hbar^2 \rho \omega_{gi}} \frac{1}{2b_{00}}, \quad (5.2.5c)$$

$$C_{0fi} = \frac{m_d D_{fi}^2}{2\hbar^2 \rho \omega_{fi}} \frac{1}{2b_{00'}}, \quad (5.2.5d)$$

$$A_{0'} = \frac{m_{d'} D_{ac}^2 k_B T}{\hbar^3 \rho s_l^2} \frac{1}{2b_{0'0'}}, \quad (5.2.5e)$$

$$B_{0'} = \pi m_{d'} (\Delta \Lambda e E_{\text{eff}})^2 / \hbar^3, \quad (5.2.5f)$$

$$C_{0'gi} = \frac{m_{d'} D_{gi}^2}{2\hbar^2 \rho \omega_{gi}} \frac{1}{2b_{0'0'}}, \quad (5.2.5g)$$

$$C_{0'fi} = \frac{m_{d'} D_{fi}^2}{2\hbar^2 \rho \omega_{fi}} \frac{1}{2b_{0'0'}}, \quad (5.2.5h)$$

$$C'_{0fi} = \frac{m_d D_{fi}^2}{2\hbar^2 \rho \omega_{fi}} \frac{1}{2b_{00'}}, \quad (5.2.5i)$$

ここで、 A は音響フォノン、 B は表面粗さ、 C はインターバレーフォノンによる散乱確率を表し、 $u(E)$ は単位階段関数 ($E \geq 0$ で $u(E) = 1$ 、 $E < 0$ で $u(E) = 0$) で、2DEG の状態密度関数がエネルギーに依存しないという性質からくるものである (第 3 章参照)。 $N_{fi(gi)}$ は式 (3.6.2) で表される各フォノンモードに対応するフォノンの数であり、 ΔE は二つのサブバンド間のエネルギー差で、式 (5.2.3) の因子 4 はサブバンド $E_{0'}$ のバレーの縮重度で、同様に式 (5.2.4) の因子 2 はサブバンド E_0 の縮重度である (図 5.1 参照)。

式 (5.2.3)、(5.2.4) で表される散乱確率はエネルギーに関してステップ状となるので、電子に対する分布関数にマックスウェル-ボルツマン分布を仮定すると散乱緩和時間のエネルギー平均値は、次に示すように解析的にかつ厳密に計算することができる。式 (5.2.3) を式 (3.4.20) に代入すると次式を得る。

$$\begin{aligned}
\langle \tau_{ps} \rangle &= \frac{F(0, x_{gi})}{A_0 + B_0 + C_{0gi} N_{gi}} \\
&+ \frac{F(x_{gi}, x_0)}{A_0 + B_0 + C_{0gi} (2N_{gi} + 1)} \\
&+ \frac{F(x_0, x_0 + x_{fi})}{A_0 + B_0 + C_{0gi} (2N_{gi} + 1) + 4C_{0fi} N_{fi}} \\
&+ \frac{G(x_0 + x_{fi})}{A_0 + B_0 + C_{0gi} (2N_{gi} + 1) + 4C_{0fi} (2N_{fi} + 1)}, \tag{5.2.6}
\end{aligned}$$

ここで、次のような無次元量を用いている。

$$x_{gi} = \hbar\omega_{gi}/k_B T, \tag{5.2.7a}$$

$$x_{fi} = \hbar\omega_{fi}/k_B T, \tag{5.2.7b}$$

$$x_0 = \Delta E/k_B T = (E_{0'} - E_0)/k_B T, \tag{5.2.7c}$$

そして、関数 $F(x, y)$ と $G(x)$ は次のように定義される。

$$F(x, y) = \int_x^y x \exp(-x) dx = (1+x)\exp(-x) - (1+y)\exp(-y), \tag{5.2.8a}$$

$$G(x) = \int_x^\infty x \exp(-x) dx = (1+x)\exp(-x). \tag{5.2.8b}$$

同様にしてサブバンド $E_{0'}$ における散乱緩和時間のエネルギー平均値は次のように与えられる

$$\begin{aligned}
\langle \tau_{ps'} \rangle &= \frac{F(0, x_{gi})}{A_{0'} + B_{0'} + C_{0'gi} N_{gi} + 2C_{0'fi} N_{fi} + 2C_{0'fi}' (2N_{fi} + 1)} \\
&+ \frac{F(x_{gi}, x_{fi})}{A_{0'} + B_{0'} + C_{0'gi} (2N_{gi} + 1) + 2C_{0'fi} N_{fi} + 2C_{0'fi}' (2N_{fi} + 1)} \\
&+ \frac{G(x_{fi})}{A_{0'} + B_{0'} + C_{0'gi} (2N_{gi} + 1) + 2C_{0'fi} (2N_{fi} + 1) + 2C_{0'fi}' (2N_{fi} + 1)}, \tag{5.2.9}
\end{aligned}$$

ここで、上式中の積分区間のエネルギーの大小は $0 < x_{gi} < x_0 - x_{fi} < x_{fi} < x_0$ であつ、 $x_{gi} < x_{fi}$ としている。緩和時間のエネルギー平均値はエネルギーの低いフォノンから高いフォノンへと散乱確率が一定の区間を順に積分する。

インターバレーフォノンのそれぞれ三種類の f タイプと g タイプのフォノンモードを含んだサブバンド E_0 と $E_{0'}$ における散乱確率は次式で与えられる

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{ps}} = & (A_0 + B_0)u(E) + \sum_{i=1}^3 C_{0gi} [N_{gi}u(E) + (N_{gi} + 1)u(E - \hbar\omega_{gi})] \\ & + 4 \sum_{i=1}^3 C_{0fi} [N_{fi}u(E - \Delta E + \hbar\omega_{fi}) \\ & + (N_{fi} + 1)u(E - \Delta E - \hbar\omega_{fi})], \end{aligned} \quad (5.2.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{ps'}} = & (A_{0'} + B_{0'})u(E) \\ & + \sum_{i=1}^3 C_{0'gi} [N_{gi}u(E) + (N_{gi} + 1)u(E - \hbar\omega_{gi})] \\ & + 2 \sum_{i=1}^3 C_{0'fi} [N_{fi}u(E) + (N_{fi} + 1)u(E - \hbar\omega_{fi})] \\ & + 2 \sum_{i=1}^3 C'_{0fi} [N_{fi}u(E) + (N_{fi} + 1)u(E + \Delta E - \hbar\omega_{fi})]. \end{aligned} \quad (5.2.11)$$

これらの式を式 (3.4.20) に代入して音響フォノン、インターバレーフォノン、表面粗さの三つの散乱機構による緩和時間のエネルギー平均値 $\langle \tau_{ps} \rangle$ と $\langle \tau_{ps'} \rangle$ が得られる。

低温領域では上記の三つの散乱機構に加えてイオン化不純物によるクーロン散乱が支配的となる。Price^{6,7)}により導かれた反転電子によるスクリーニング効果を考慮したイオン化不純物による散乱確率の式 (3.9.16) を用いて計算するが、この式は 2DEG の散乱前後の波ベクトルで表されるベクトル $\vec{Q} = \vec{k}_{\parallel} - \vec{k}'_{\parallel}$ に依存するため計算機を用いて数値計算より求めた。最終的に移動度を求めるために、Stern⁸⁾ が指摘しているように近似的な方法である

が、サブバンド E_0 における散乱緩和時間のエネルギー平均値は次式から求める。

$$\frac{1}{\langle \tau_0 \rangle} = \frac{1}{\langle \tau_{\text{ion}} \rangle} + \frac{1}{\langle \tau_{\text{ps}} \rangle}, \quad (5.2.12)$$

ここで $\langle \tau_{\text{ion}} \rangle$ はイオン化不純物による散乱緩和時間のエネルギー平均値である。同様にしてサブバンド $E_{0'}$ の散乱緩和時間 $\langle \tau_0 \rangle$ のエネルギー平均値が求められる。各サブバンドにおける散乱緩和時間のエネルギー平均値が得られると平均移動度 μ が与えられる。

$$\mu = \frac{(N_0 e \langle \tau_0 \rangle / m_c + N_{0'} e \langle \tau_0 \rangle / m_{c'})}{(N_0 + N_{0'})}, \quad (5.2.13)$$

ここで、 N_0 と $m_c (= m_t)$ はサブバンド E_0 における電子の電子密度（占有率）と導電質量で、同様にして $N_{0'}$ と $m_{c'} (= 2m_t m_l / (m_t + m_l))$ はサブバンド $E_{0'}$ における値である。上式より明かなように N_0 と $N_{0'}$ は各サブバンドの電子占有率としても移動度の値は同じとなるので以下の解析では $N_0, N_{0'}$ は電子占有率としている。

5-3 垂直電界依存性

室温における移動度の実効電界依存性の実験結果と計算結果の比較を図 5.3 に示す。図中の白丸はコンダクタンス法により得られた実効移動度で、一点鎖線は Cooper と Nelson⁹⁾ が測定したドリフト移動度である。今回実験に用いた試料の不純物濃度は $N_A = 8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ で、Cooper と Nelson が用いた試料では $N_A = 1.2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ であるが、測定された移動度はよく一致している。このことは、異なる不純物濃度をもつ MOSFETs の実効移動度が高電界領域でユニバーサル曲線に乗るという Takagi *et al.*¹⁰⁾ の測定結果とよく一致している。図中の実線は上に述べた解析方法で計算した移動度である。計算に用いた物理定数は表 5.1 のと表 5.2 に示すものである。音響フォノンによる変形ポテンシャルの値は $D_{\text{ac}} = 12 \text{ eV}$ ¹¹⁾ を用いた。実線は表面粗さのパラメータ $\Delta\Lambda$ を変化させたときの値で、

表 5.2 移動度の計算に用いた物理定数。

m_0	自由電子の質量	9.11×10^{-31} (kg)
m_l	縦方向の有効質量	$0.916m_0$
m_t	横方向の有効質量	$0.19m_0$
m_d	サブバンド E_0 における 有効状態密度質量	$0.19m_0$
$m_{d'}$	サブバンド $E_{0'}$ における 有効状態密度質量	$0.417m_0$
m_c	サブバンド E_0 における 有効導電質量	$0.19m_0$
$m_{c'}$	サブバンド $E_{0'}$ における 有効導電質量	$0.3147m_0$
ρ	Si の結晶密度	2,329 (kg/m ³)
s_l	Si の音速	9,037 (m/s)
κ_{Si}	Si の相対誘電率	11.7
D_{ac}	音響フォノンのディフォメーション ポテンシャル	12 (eV)

それぞれ $\Delta A = (1)20 \times 10^{-20} \text{ m}^2$ (2) $25 \times 10^{-20} \text{ m}^2$ (3) $30 \times 10^{-20} \text{ m}^2$ である。測定された移動度はこれらの表面粗さパラメータの範囲で計算結果とよい一致を示している。低電界領域で移動度に影響するのは電子の占有率と電子の閉じ込め量 b_{mn} である。

Schrödinger 方程式と Poisson 方程式を自己無撞着に解いて得られた実効電界に対するサブバンドエネルギー、電子占有率、および電子の閉じ込め量 b_{mn} を図 5.4 ~ 5.6 に示す。計算条件は、温度 $T = 300 \text{ K}$ で不純物濃度が $N_A = 8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ の (100) Si 反転層である。図 5.4 と 5.5 より実効電界が強くなるとサブバンドエネルギー $E_{0'}$ と E_0 とのエネルギー差が大きくなり、それに伴って $N_{0'}$ にいる電子が N_0 に再分布する様子が分かる。電子が $N_{0'}$ から N_0 に遷移すると、各サブバンドにおける移動度は各サブバンドの有効状態密度質量と導電質量の積に反比例するので平均移動度は上昇する。一方、実効電界が強くなると図 5.6 より電子の閉じ込め量 b_{mn} が小さくなりフォノンによる散乱確率が増加して移動度は低下する。低電界領域で移動度が徐々に減少しているのは b_{mn} が主に効いていること

によるものであることが分かる。移動度の計算値が実験値より少し高くなっているのは、今回の解析モデルではエネルギーの最も低い二つのサブバンドのみを考慮しており、室温付近ではさらに高エネルギーのサブバンドにも電子が存在するためである。Emunds *et al.*¹²⁾ はサブバンドの数を多数考慮することにより計算結果が Cooper と Nelson の値とよく一致することを示している。

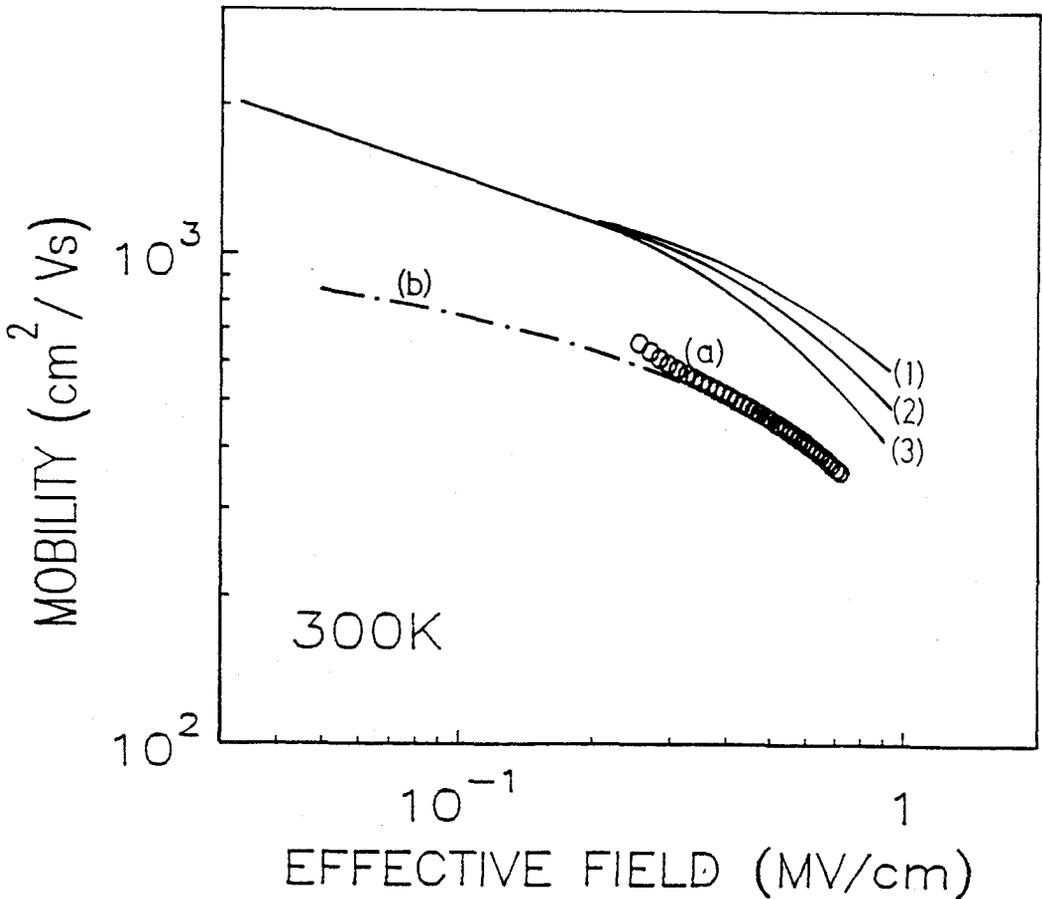


図 5.3 室温における移動度の実効電界依存性。実線 (1) ~ (3) は表面粗さパラメータ $\Delta\Lambda = 20 \times 10^{-20} \text{m}^2$ (1)、 $25 \times 10^{-20} \text{m}^2$ (2)、 $30 \times 10^{-20} \text{m}^2$ (3) を用いて計算された移動度。白丸による曲線 (a) はコンダクタンス法で得られた実効移動度で、一点鎖線 (b) は Cooper と Nelson が実験で得た移動度。

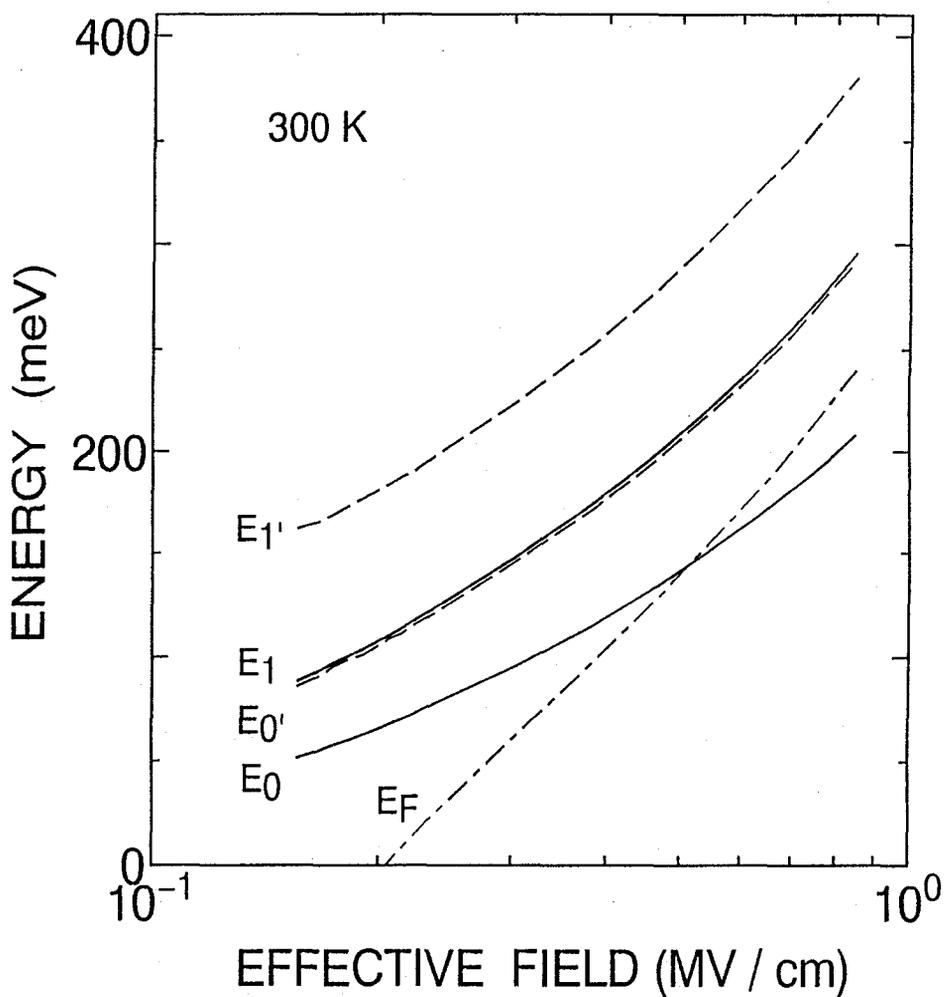


図 5.4 温度 $T = 300$ K、アクセプタ密度 $N_A = 8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ で、(100) Si 反転層内におけるサブバンドエネルギー E_i とフェルミエネルギー E_F の実効電界依存性。

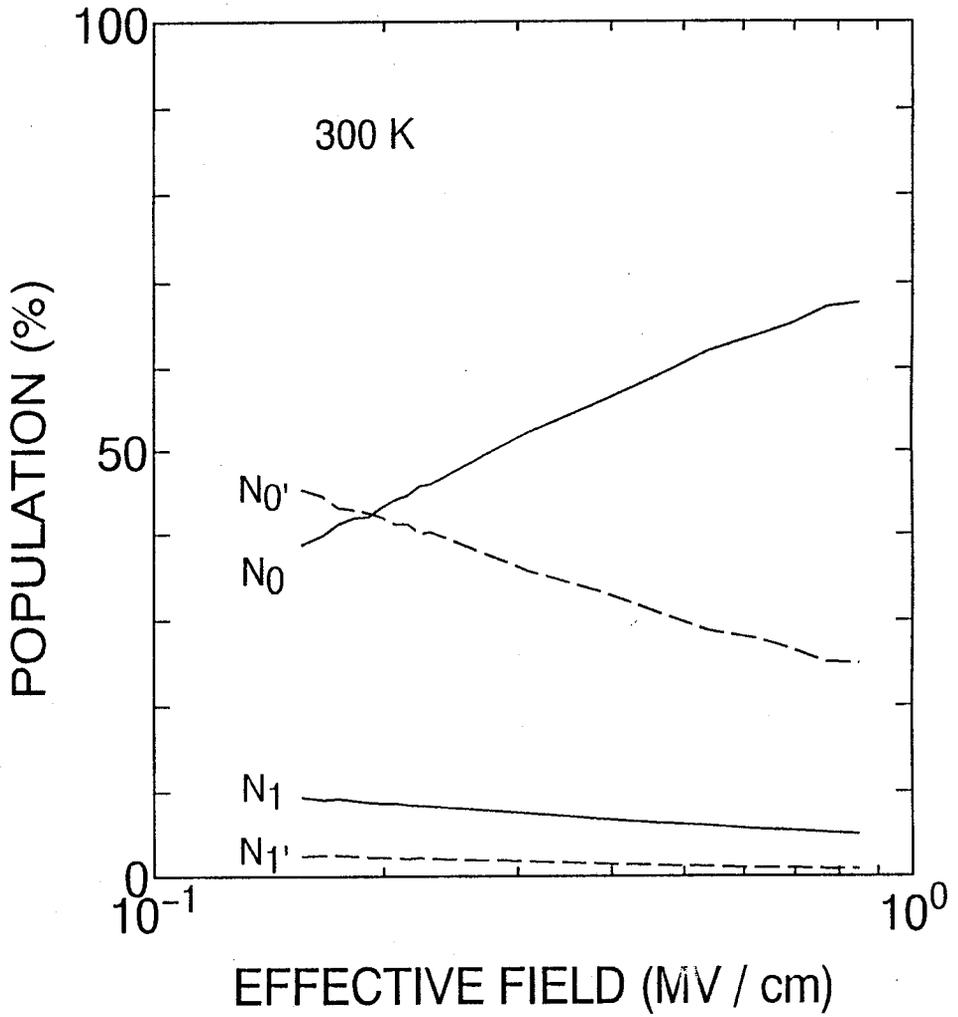


図 5.5 温度 $T = 300 \text{ K}$ 、アクセプタ密度 $N_A = 8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ で、(100) Si 反転層内における電子占有率 N_i の実効電界依存性。

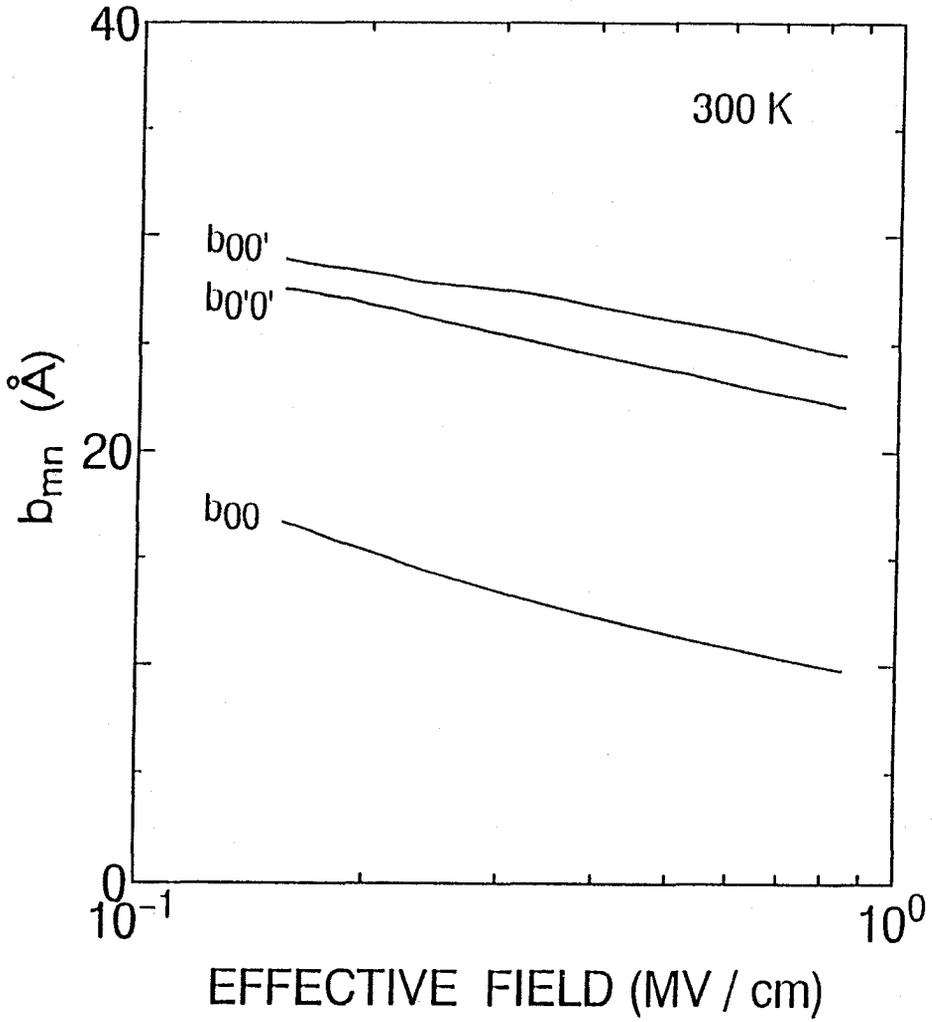


図 5.6 温度 $T = 300$ K、アクセプタ密度 $N_A = 8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ で、(100) Si 反転層内における電子の閉じこめに相当する量 b_{mn} の実効電界依存性。

次に、液体窒素温度における移動度の実効電界依存性を図 5.7 に示す。図中の白丸は室温のデータと同じくコンダクタンス法により得られた実効移動度で、実線はイオン化不純物濃度が $N_A = 8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 、表面粗さパラメータが $\Delta\Lambda = 25 \times 10^{-20} \text{ m}^2$ として行った計算結果である。低電界領域で計算値の方が少し大きくなっているが、全体的に良い一致を示している。又、図中に示している一点鎖線は、音響フォノン散乱、インターバレーフォノン散乱および表面粗さ散乱による移動度を示し、二点鎖線はイオン化不純物散乱による移動度を示している。イオン化不純物散乱が効いている低電界領域で移動度が実効電界の増加とともに上昇するのは、誘起された電子のスクリーニング効果により散乱確率が減少するためである。一方高電界側での急激な移動度の低下は、図 4.5 にも示したように、 E_{eff}^{-2} 特性でよく表される。これは式 (3.8.13) で示されるように表面粗さによる散乱確率が実効電界の自乗に比例することから、表面粗さ散乱の寄与であるとしてよく説明される。

5-4 温度依存性

本章では、5-2 節で表した電子の量子効果と四つの散乱機構考慮した解析モデルを用いて 15 ~ 300 K の範囲で測定した実効移動度の温度依存性について解析を行う。

4 章の図 4.4 に示したさまざまな反転電子密度に対する電子移動度の温度依存性のうちで、反転電子密度がそれぞれ $N_s = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ と $3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ に対する実効移動度の温度依存性を図 5.8 と 図 5.9 に示す。図中の黒丸は実験結果で、同時に上で述べた解析方法で計算した移動度も実線で示している。実線 (μ_{total}) は不純物濃度を $N_A = 8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 、表面粗さパラメータを $\Delta\Lambda = 25 \times 10^{-20} \text{ m}^2$ として行った計算結果である。物理的な説明を行うために個々の散乱要因による移動度、すなわち音響フォノン散乱 (μ_{ac})、インターバレーフォノン散乱 (μ_{int})、表面粗さ散乱 (μ_{sr})、およびイオン化不純物散乱 (μ_{ion}) による移動度を図示した。これらの結果より明かなように 100 K より低い温度では、図 5.8 の反転

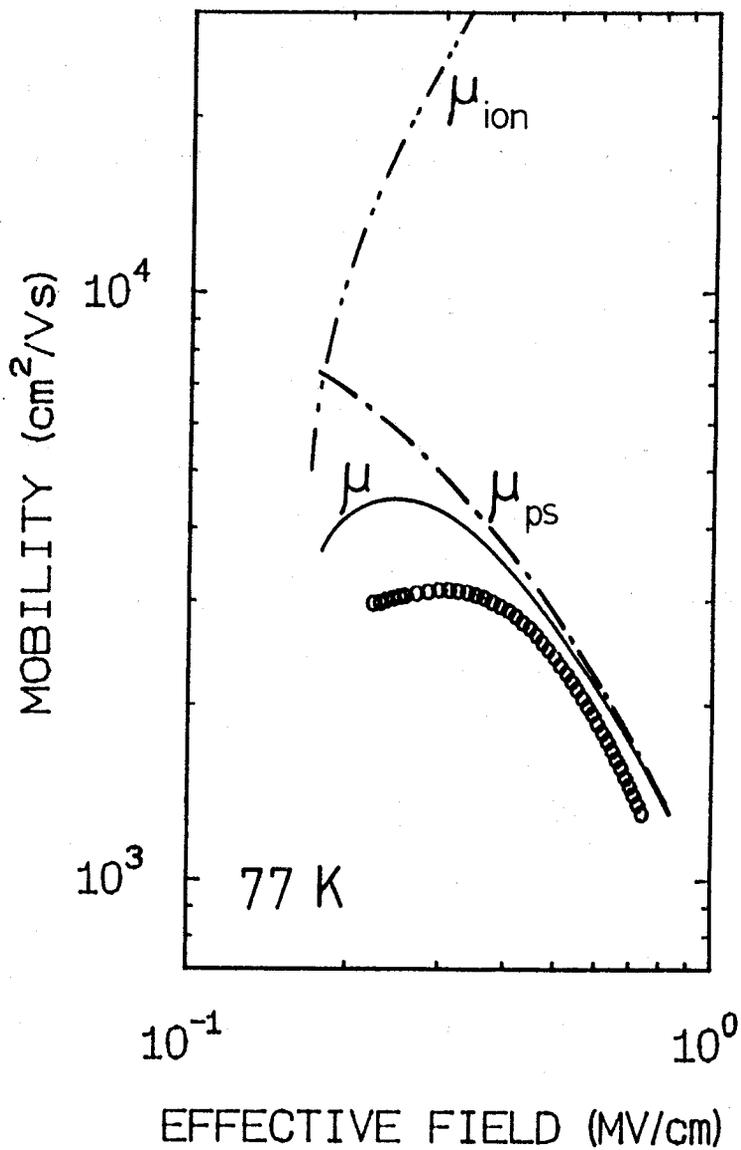


図 5.7 液体窒素温度における移動度の実効電界依存性。白丸による曲線はコンダクタンス法で得られた実効移動度で、実線は表面粗さパラメータ $\Delta\Lambda = 25 \times 10^{-20} \text{m}^2$ を用いて計算された移動度。一点鎖線 μ_{ps} は音響フォノン散乱、インターバレーフォノン散乱、および表面粗さ散乱による移動度の計算値。二点鎖線 μ_{ion} はイオン化不純物散乱による移動度の計算値。

電子密度が低い $N_s = 1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ の場合にはイオン化不純物散乱が支配的となり、図 5.9 のように反転電子密度が $N_s = 3 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ と高くなると、表面粗さ散乱が支配的となることが分かる。これは低い電子密度ではイオン化不純物が十分スクリーニングされず、また実効電界も低いために表面粗さ散乱が弱いためである。一方、100 K より高温では反転電子密度に関係無く測定された移動度は $T^{-n} (n > 1)$ の特性となり、今までに報告されている結果^{13,14)} とよく一致している。また、Takagi *et al.*¹⁵⁾ は室温より高温領域で移動度は $T^{-1.75}$ に依存する実験結果を報告している。これらの実験結果は図 5.8 と図 5.9 の計算結果をみるとよく理解できる、すなわち高温領域では音響フォノン散乱による移動度が主に効いているが室温付近では音響フォノン散乱に加えてインターバレーフォノン散乱が効いてくることがわかる。個別の散乱プロセスの計算によると、音響フォノン散乱のみによる移動度 μ_{ac} は T^{-1} に比例し、インターバレーフォノン散乱のみによる移動度 μ_{int} はほぼ T^{-3} に近い特性となる。

コンダクタンス法を用いて測定した 15 ~ 300 K の温度範囲における Si 反転層内移動度の温度依存性について定量的に解析を行った結果、次のことが明らかとなった。計算で求めた移動度は測定から得られた移動度とよく一致することがわかった。すなわち、100 K 以上の温度では電子移動度の温度依存性が $T^{-n} (n > 1)$ となるのはフォノンによる散乱でよく説明できる。一方、100 K 以下の温度では、反転電子密度が少ない領域ではイオン化不純物散乱が移動度を支配しており、スクリーニング効果を考慮する必要があることを示している。また、電子密度が増加し、実効電界が高くなると、表面粗さ散乱が重要となる。

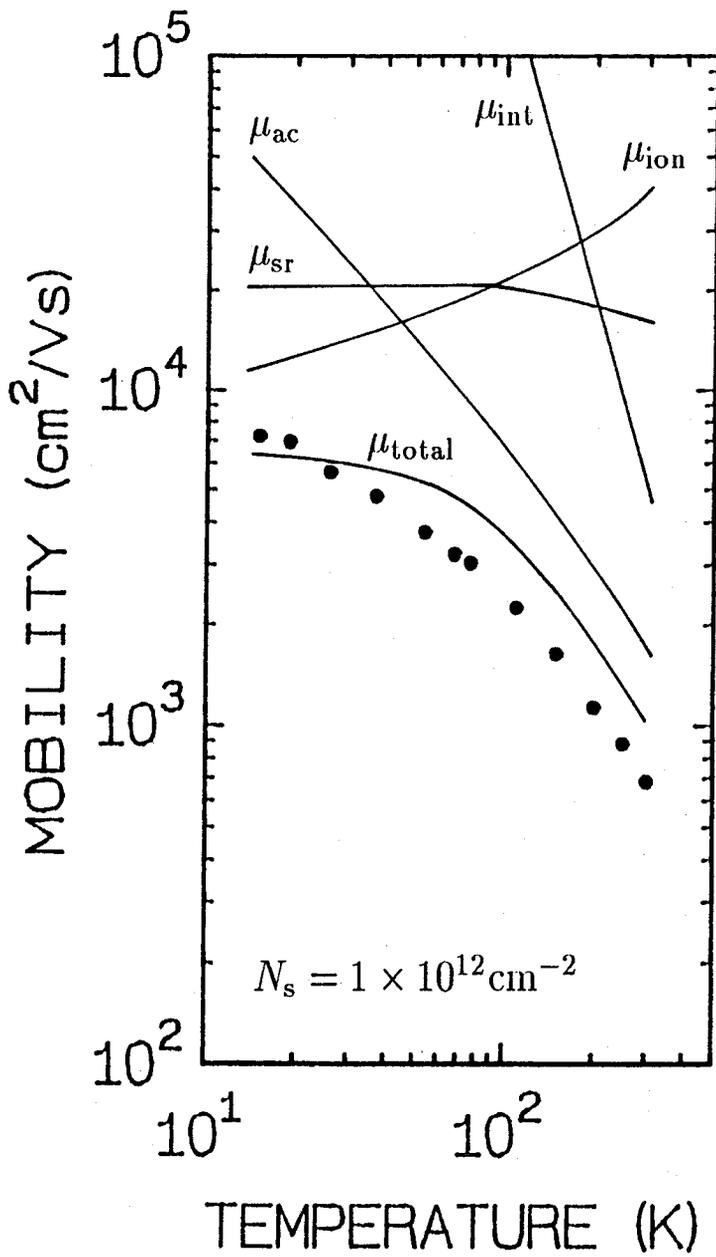


図 5.8 反転電子密度 $N_s = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ におけるコンダクタンス法より得られた実効移動度 (●) と実線は計算より得られた移動度の温度依存性。

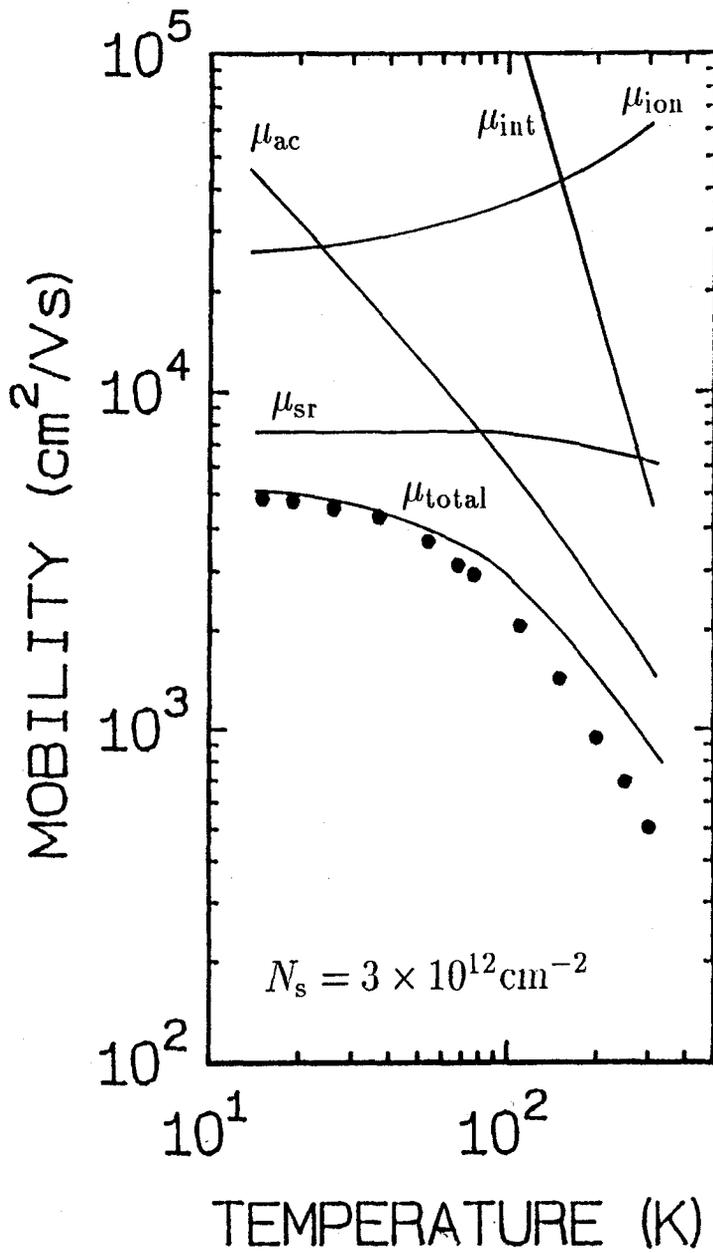


図 5.9 反転電子密度 $N_s = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ におけるコンダクタンス法より得られた実効移動度 (●) と実線は計算より得られた移動度の温度依存性。

5-5 縮退を考慮した二次元電子ガス移動度

上に述べた電子移動度の解析は縮退を考慮していない。しかし、図 5.4 に示すように室温においても実効電界が 0.5 MV/cm 付近より高くなると、フェルミレベルがサブバンド E_0 より高くなっており、電子移動度の解析には縮退を考慮することが必要であることがわかる。縮退を考慮した場合の電子移動度の解析では、散乱確率は式 (3.3.22) を用い

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{11}(\vec{k}_{\parallel})} &= \frac{1}{1 - f_0(\vec{k}_{\parallel})} \sum_{\vec{k}'_{\parallel}} P(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}) [1 - f_0(\vec{k}'_{\parallel})] \left(1 - \frac{k_{x'}}{k_x}\right) \\ &= \frac{1}{1 - f_0(\vec{k}_{\parallel})} \frac{A}{2\pi^2} \int d^2 \vec{k}'_{\parallel} P(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}) [1 - f_0(\vec{k}'_{\parallel})] \left(1 - \frac{k_{x'}}{k_x}\right), \end{aligned} \quad (5.5.1)$$

散乱緩和時間のエネルギー平均値は式 (3.4.15) より

$$\langle \tau_{11} \rangle = - \int_0^{\infty} E \tau_{11} \frac{df_0(E + E_i)}{dE} dE \Big/ \int_0^{\infty} f_0(E + E_i) dE, \quad (5.5.2)$$

としなければならない。ここで、分布関数 f_0 は式 (3.4.16) のフェルミ-ディラック分布関数

$$f_0(E) = 1 / \left[1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) \right], \quad (5.5.3)$$

である。散乱確率の式 (5.5.1) において縮退を考慮した場合は

$$\frac{1 - f_0(\vec{k}'_{\parallel})}{1 - f_0(\vec{k}_{\parallel})}, \quad (5.5.4)$$

の項が縮退を考慮しない場合に比べて付加されている。このことは音響フォノンや表面粗さによる散乱では散乱前後の電子エネルギーがあまり変化しないとすると上記の項は 1 となり縮退の効果は無視できる。インターバレーフォノンによる散乱のように大きいエネルギーのフォノンを介して遷移が起こる場合は縮退の効果は無視できない。

例えば、図 5.1 に示すような (100) Si で 0 と 0' 番目の二つのサブバンドを考慮して、フォノンエネルギーが $\hbar\omega_{gi}$ と $\hbar\omega_{fi}$ でディフォメーションポテンシャルが D_{gi} と D_{fi} の g

タイプと f タイプのインターバレーフォノン g_i と f_i による散乱確率を求めると

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{\text{int}}} = & \frac{m_d D_{g_i}^2}{2\hbar^2 \rho \omega_{g_i}} \frac{1}{2b_{00}} \left\{ N_{g_i} \frac{1 - f_0[E_0(\vec{k}_{\parallel}) + \hbar\omega_{g_i}]}{1 - f_0[E_0(\vec{k}_{\parallel})]} \right. \\ & \left. + (N_{g_i} + 1) \frac{1 - f_0[E_0(\vec{k}_{\parallel}) - \hbar\omega_{g_i}]}{1 - f_0[E_0(\vec{k}_{\parallel})]} u(E - \hbar\omega_{g_i}) \right\} \\ & + 4 \frac{m_{d'} D_{f_i}^2}{2\hbar^2 \rho \omega_{f_i}} \frac{1}{2b_{00'}} \left\{ N_{f_i} \frac{1 - f_0[E_0(\vec{k}_{\parallel}) + \hbar\omega_{f_i}]}{1 - f_0[E_0(\vec{k}_{\parallel})]} u(E - \Delta E + \hbar\omega_{f_i}) \right. \\ & \left. + (N_{f_i} + 1) \frac{1 - f_0[E_0(\vec{k}_{\parallel}) - \hbar\omega_{f_i}]}{1 - f_0[E_0(\vec{k}_{\parallel})]} u(E - \Delta E - \hbar\omega_{f_i}) \right\}, \quad (5.5.5) \end{aligned}$$

となる。上式の右辺の第一項目は g タイプフォノンによるバレー間散乱で、この場合は同じサブバンド内散乱となり、 N_{g_i} の項はフォノンの吸収、 $(N_{g_i} + 1)$ の項はフォノンの放出を意味している。第二項目は f タイプフォノンによるバレー間散乱で、この場合はサブバンド間散乱となり初めの係数の 4 は遷移先のバレーが四個あるからである。 m_d と $m_{d'}$ はそれぞれ 0 と 0' 番目のサブバンドにおける有効状態密度質量で、 ΔE は 0 と 0' 番目のサブバンド間のエネルギー差である。

音響フォノン散乱と表面粗さ散乱および三種類の f タイプと三種類の g タイプのフォノンモードを含んだインターバレーフォノン散乱による移動度の縮退を考慮した計算結果を図 5.10 に示す。図には比較のため、実線で縮退を考慮していない場合の計算値を、破線で縮退を考慮した場合の結果が示してある。図中の白丸と一点鎖線は図 5.3 と同じでそれぞれコンダクタンス法で得た実験結果と Cooper と Nelson の実験結果である。ここで表面粗さ散乱におけるパラメータは $\Delta\Lambda = 25 \times 10^{-20} \text{m}^2$ とした。縮退を考慮した場合インターバレーフォノン散乱による移動度は低下していることがわかる。しかし、室温では主に効く散乱は音響フォノン散乱と表面粗さ散乱であるので、全体の移動度には縮退を考慮してもほとんど影響がないことが分かる。

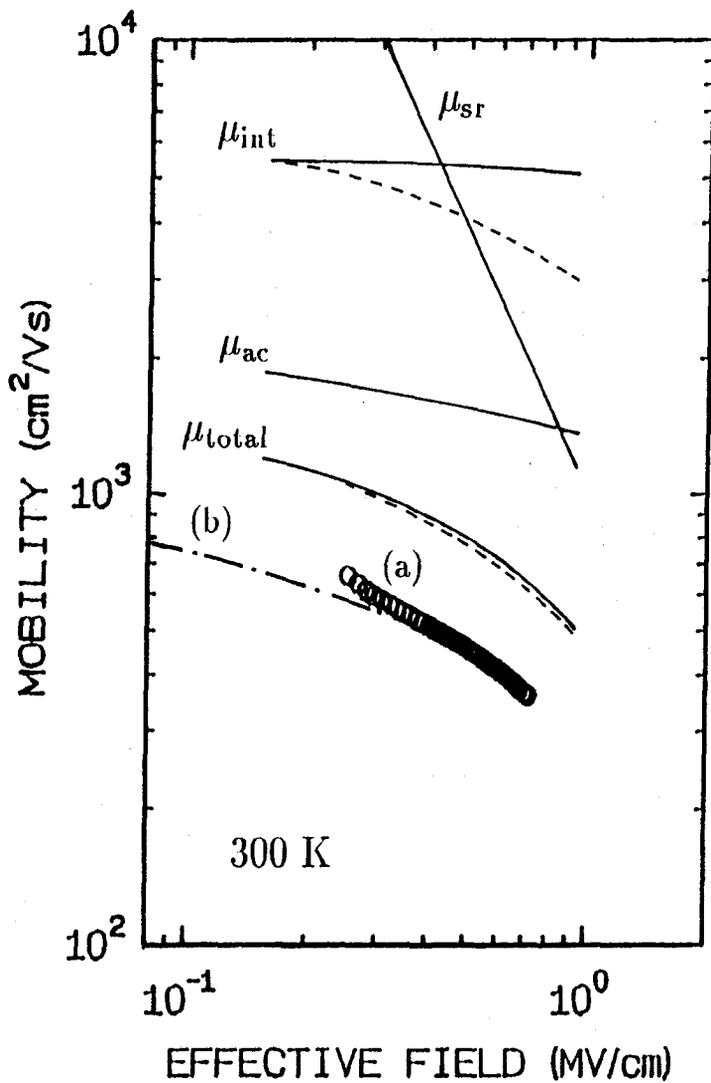


図 5.10 室温における移動度の実効電界依存性。実線は縮退を考慮しない場合の移動度の計算値で、破線は縮退を考慮した場合の移動度の計算値である。表面粗さパラメータは $\Delta\Lambda = 25 \times 10^{-20} \text{m}^2$ を用いた。白丸の曲線 (a) はコンダクタンス法で得られた実効移動度で、一点鎖線 (b) は Cooper と Nelson が実験で得た移動度。

5-6 結言

ここでは、Si 反転層内における電子移動度の理論的な解析を行った。二次元電子ガスの性質から音響フォノン、インターバレーフォノン、および表面粗さを含んだ散乱による移動度は解析的な式で表せることを示し、低温で重要となるイオン化不純物散乱を考慮した移動度は近似式を用いた。このようにして得られた計算結果と実験結果を比較検討した結果、次のような知見を得た。

- 1) 100 K 以上の高温領域においては 2DEG と三次元フォノンとの相互作用でよく説明でき、電子移動度の温度依存性が T^{-n} ($n > 1$) となるのは音響フォノン散乱に加えてインターバレーフォノン散乱が効いてくるためである。
- 2) 高電界領域においては E_{eff}^{-2} の特性を持つ表面粗さ散乱で説明できる。
- 3) 低温の低電界領域ではイオン化不純物散乱が効いており、また、スクリーニング効果が重要である。
- 4) 室温における実効電界依存性で、縮退を考慮した場合、インターバレーフォノン散乱による移動度は低下するが、全体の移動度にはほとんど影響が見られなかった。

本章の参考文献

- 1) R. Brunetti, C. Jacoboni, F. Nava, L. Reggiani, G. Bosman and J. J. Zijlstra :
J. Appl. Phys. **52** (1981) 6713.
- 2) K. Masaki, C. Hamaguchi, K. Taniguchi and M. Iwase :
Jpn. J. Appl. Phys. **28** (1989) 1856.
- 3) K. Masaki, C. Hamaguchi, K. Taniguchi and M. Iwase :
Jpn. J. Appl. Phys. **30** (1991) 2734.
- 4) 飯塚、石坂、大井、福間、御子柴 : 第 38 回応用物理関係連合講演会
28p-ZR-1 (1991 春季) 1228.
- 5) F. Stern : Phys. Rev. **B5** (1972) 4891.
- 6) P. J. Price : J. Vac. Sci. & Technol. **19** (1981) 599.
- 7) P. J. Price : Surf. Sci. **113** (1982) 199.
- 8) F. Stern : *Phys. Rev. Lett.* **44** (1980) 1469.
- 9) J. A. Cooper, Jr. and D. F. Nelson : J. Appl. Phys. **54** (1983) 1445.
- 10) S. Takagi, M. Iwase and A. Toriumi : *Int. Electron Device Meet. Tech. Dig.*
(IEEE, New York, 1988) p398.
- 11) H. Ezawa, S. Kawaji and K. Nakamura : Jpn. J. Appl. Phys. **13** (1974) 126.
- 12) A. Emunds, Chr. Jungemann and W. L. Engl : *Ext. Abs. of the 23th Conf.*
on Sol. St. Dev. and Mat., Yokohama, Japan, (1991) p462.
- 13) F. F. Fang and A. B. Fowler : Phys. Rev. **169** (1968) 619.
- 14) N. Kotera, Y. Katayama, I. Yoshida and F. Komatsubara :
J. Vac. Sci. & Technol. **9** (1972) 754.

- 15) S. Takagi, M. Iwase and A. Toriumi : *Ext. Abs. of the 22th Conf. on Sol. St. Dev. and Mat., Tokyo, Japan, (1990) p275.*

6章 Si 反転層内における移動度のユニバーサル性

6-1 緒言

Si 反転層内における電子移動度は実効電界で表すと基板不純物濃度や基板バイアス電圧に関係無く一つのユニバーサルな曲線で表されることが Sabnis と Clemens¹⁾ により報告され、これが移動度のモデル化に有効であることが知られるようになってきた^{2,3)}。Takagi *et al.*⁴⁾ は、不純物濃度が $10^{15} \sim 10^{18} \text{cm}^{-3}$ と広い範囲の試料を用いてユニバーサル性の適用できる限界を検討した結果、フォノン散乱と表面粗さ散乱の効く領域でユニバーサル性が成り立ち、クーロン散乱が効く領域ではユニバーサル性からずれることを明らかにしている。さらに、Takagi *et al.*⁵⁾、実効電界を表すパラメータである η の値はキャリアの種類や試料の結晶面によって異なることを報告している。Huang と Gildenblat⁶⁾ は、パラメータ η が温度に依存するとを報告している。基板バイアス電圧を印加したり、基板不純物濃度を増加させることは同じ反転電子密度に対して表面電界を強くすることになり、電子の波動関数やサブバンド構造に影響を与える。このように基板バイアス電圧や基板不純物濃度に関するユニバーサル性を物理的に解釈するためには、2DEG 状態を考慮した移動度モデルで解析する必要がある。

本章では、室温と液体窒素温度における基板バイアス電圧と基板不純物濃度に関するユニバーサル性について 5-2 節で述べた移動度の解析方法を用いて考察する。

6-2 基板バイアス電圧と基板不純物濃度に関するユニバーサル性

基板バイアス電圧に関する電子移動度の実験は、4章で述べた同じ試料を用い、移動度の測定もコンダクタンス法で行ったが、バイアス電圧を印加すると低濃度の反転電子密度でも実効電界は高くなるので、ここでは低濃度の電子密度を精度よく測定するためゲート・チャンネル容量 C_{gc} を求め、反転電子密度は次式より得た⁷⁾

$$N_s = \left(\int_{-\infty}^{V_g} C_{gc}(V_g) dV_g \right) / e, \quad (6.2.1)$$

ここで V_g はゲート電圧である。実効移動度は4章の式(4.1.5)より求めた。図6.1と図6.2にそれぞれ室温と液体窒素温度における基板バイアス電圧をパラメータとした実効移動度の反転電子密度依存性を示す。図中の記号は基板バイアス電圧 $V_{sub} = 0V(o)$ 、 $-1V(x)$ 、 $-3V(\Delta)$ 、 $-5V(\square)$ である。図6.1と図6.2より室温と液体窒素温度の両方において基板バイアス電圧の印加により移動度は低下している。これらの実効移動度を4章の式(4.3.1)で定義した実効電界で表したものを図6.3と図6.4に示す。これらの図より室温と液体窒素温度とも同じ傾向を示しており、低電界での移動度の立ち上がりはクーロン散乱における反転電子密度によるスクリーニング効果によるもので、その後の移動度の低下はフォノン散乱と表面粗さ散乱によるもので、液体窒素温度で移動度が実効電界の増加により急激に低下するのは主に表面粗さ散乱によるものである。これらの実験結果よりユニバーサル性はフォノン散乱と表面粗さ散乱の領域で成り立ち、クーロン散乱のところでユニバーサル性は成り立っていない。5章で述べた2DEG状態に基づいた移動度の解析に従って計算した結果を図6.3と図6.4の実線で示す。図中の番号(1)、(2)、(3)、(4)はそれぞれ $V_{sub} = 0V$ 、 $-1V$ 、 $-3V$ 、 $-5V$ である。これらの図よりクーロン散乱の領域では若干の差がみられるが、実験結果と計算結果とはよくその傾向が一致し、特に77Kでは定量的な一致も得られている。

基板不純物濃度に関するユニバーサル性に関する実験結果⁴⁾と計算結果を図6.5と

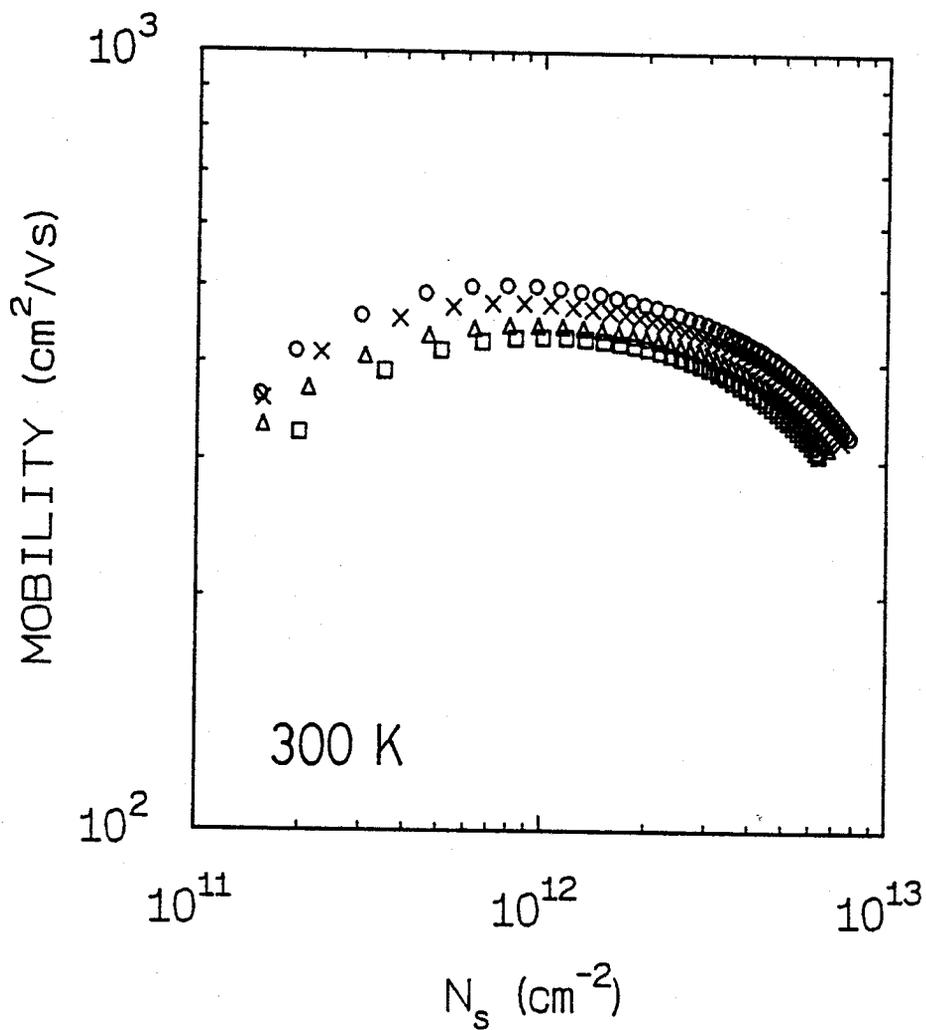


図 6.1 室温での基板バイアス電圧に関する移動度の反転電子密度依存性。基板バイアス電圧 $V_{\text{sub}} = 0, -1, -3, -5$ V に対しそれぞれ (o)、(x)、(Δ)、(\square)。

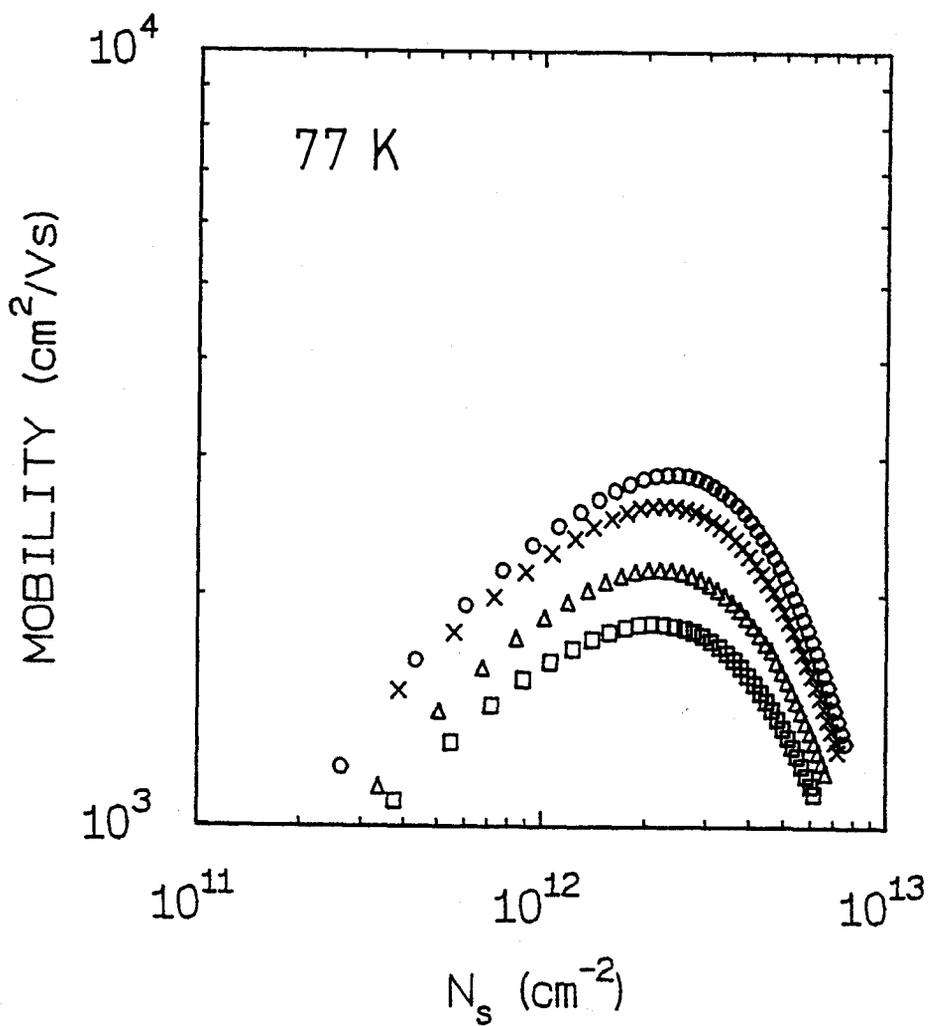


図 6.2 液体窒素温度における基板バイアス電圧に関する移動度の反転電子密度依存性。基板バイアス電圧 $V_{\text{sub}} = 0, -1, -3, -5 \text{ V}$ に対しそれぞれ (o)、(x)、(Δ)、(\square)。

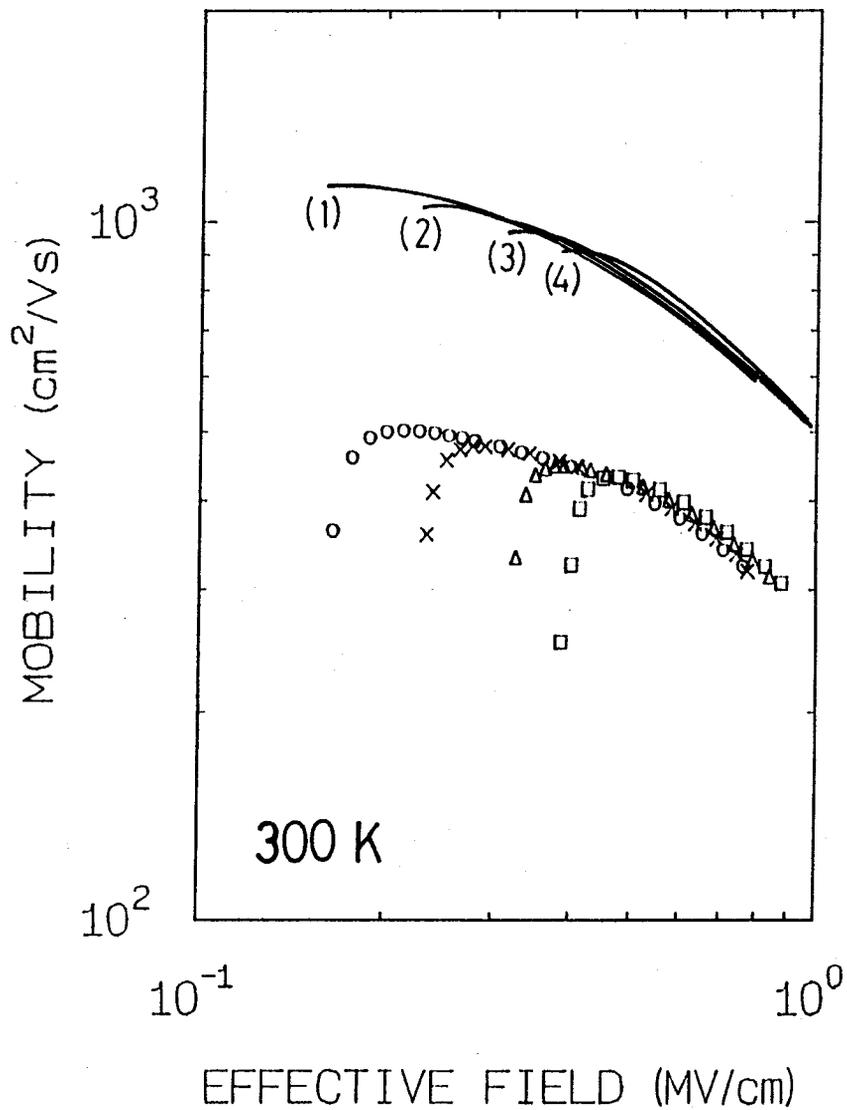


図 6.3 室温における基板バイアス電圧に関する移動度の実効電界依存性。基板バイアス電圧 $V_{\text{sub}} = 0$ 、 -1 、 -3 、 -5 V に対しそれぞれ (o)、(x)、(Δ)、(\square)。

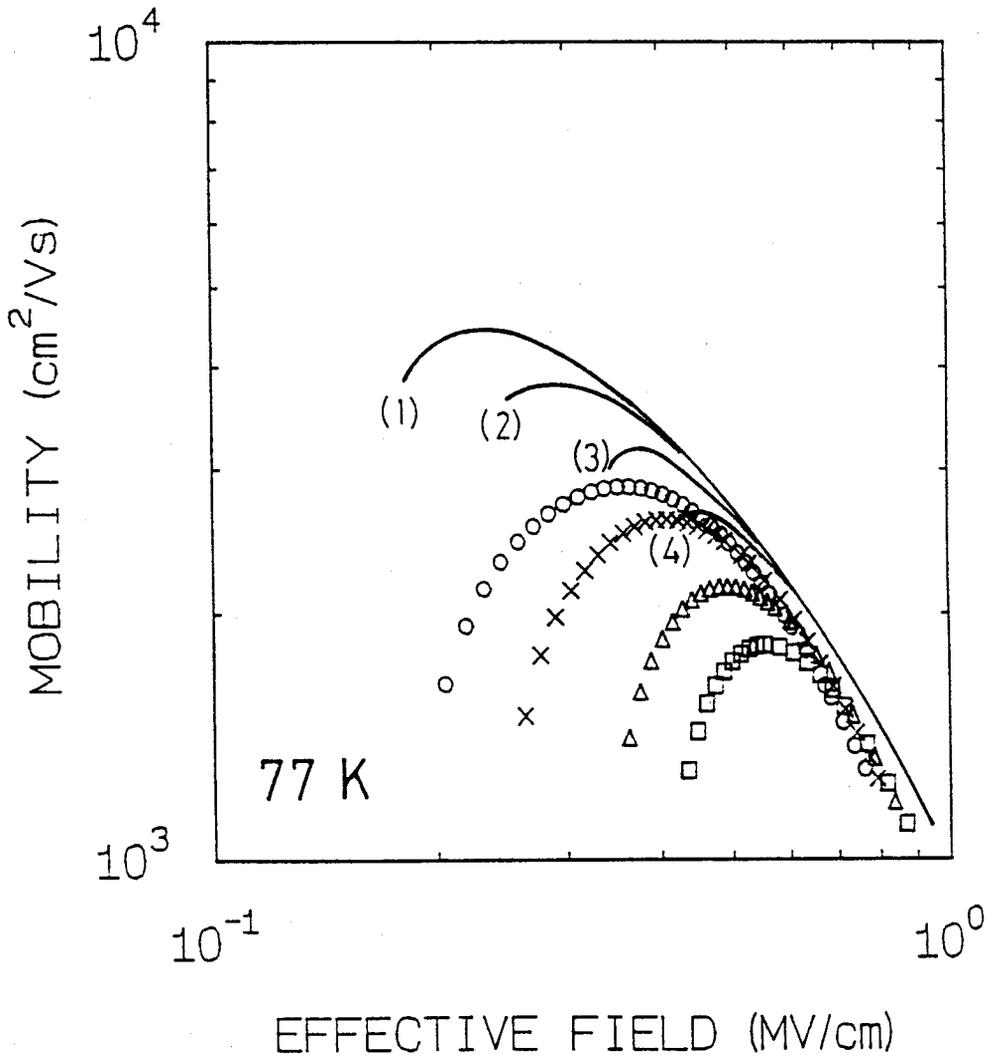


図 6.4 液体窒素温度における基板バイアス電圧に関する移動度の実効電界依存性。基板バイアス電圧 $V_{\text{sub}} = 0, -1, -3, -5 \text{ V}$ に対しそれぞれ (o)、(x)、(Δ)、(\square)。

図 6.6 に示す。図 6.5 と 図 6.6 はそれぞれ室温と液体窒素温度である。図中の記号は不純物濃度 $N_A = 3.9 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ (○)、 $2.0 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ (●)、 $7.2 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ (□)、 $3.0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ (■)、 $7.7 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ (+)、 $2.4 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ (×) の実験結果であり、番号はそれぞれ不純物濃度 $N_A =$ (1) $3.9 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ 、(2) $2.0 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ 、(3) $7.2 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ 、(4) $3.0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ 、(5) $7.7 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ 、(6) $2.4 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ の計算結果である。室温において高い不純物濃度の計算結果がユニバーサル曲線からずれている以外は実験結果と計算結果がよく一致し、基板バイアス電圧に関するユニバーサル性と同じ傾向となっている。

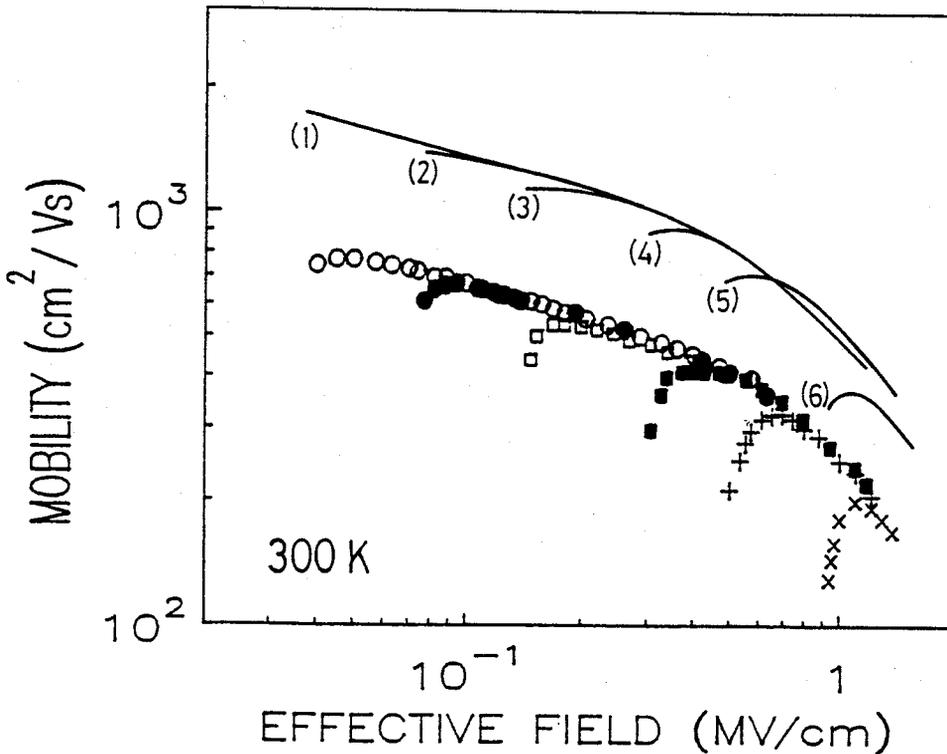


図 6.5 室温における基板不純物濃度に関する移動度の実効電界依存性。アクセプター密度 $N_A = 3.9 \times 10^{15}$ 、 2.0×10^{16} 、 7.2×10^{16} 、 3.0×10^{17} 、 7.7×10^{17} 、 $2.4 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ に対してそれぞれ (○)、(●)、(□)、(■)、(+)、(×) が実験値で、実線の番号 (1)、(2)、(3)、(4)、(5)、(6) は計算値を示す。
(Takagi *et al.*⁴⁾ より)

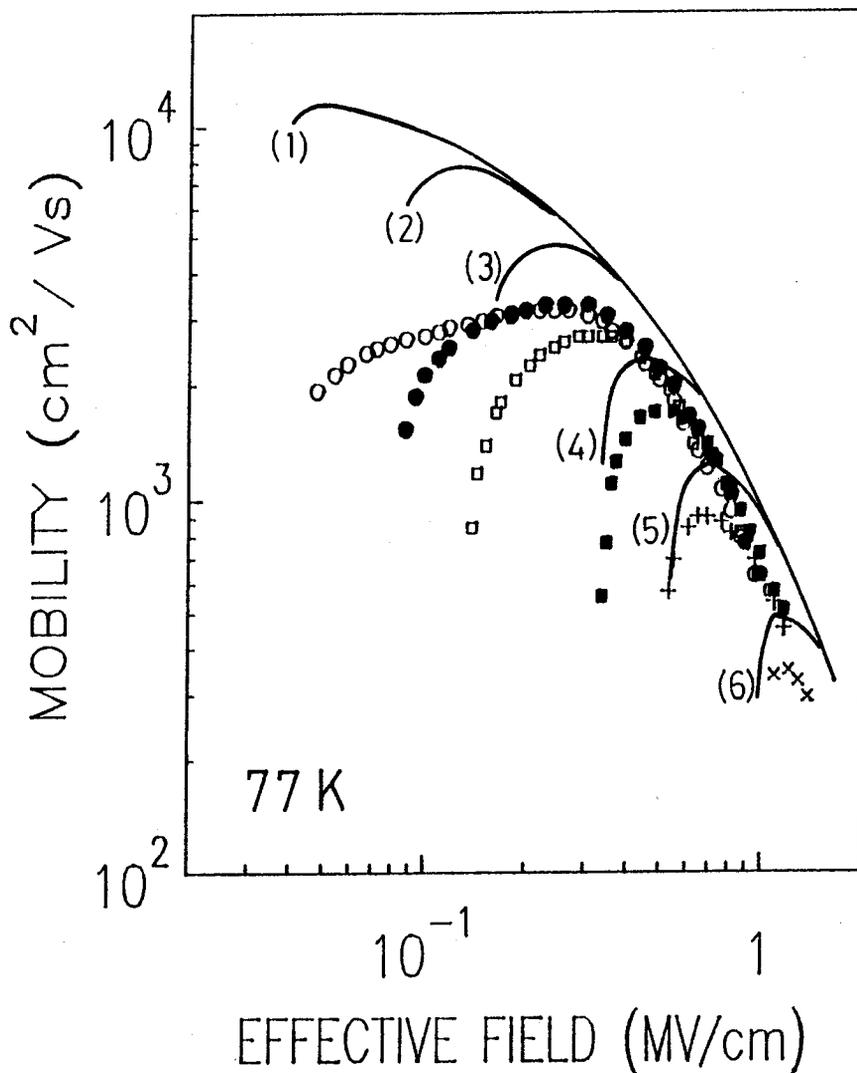


図 6.6 液体窒素温度における基板不純物濃度に関する移動度の実効電界依存性。アクセプター密度 $N_A = 3.9 \times 10^{15}$ 、 2.0×10^{16} 、 7.2×10^{16} 、 3.0×10^{17} 、 7.7×10^{17} 、 $2.4 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ に対してそれぞれ (○)、(●)、(□)、(■)、(+)、(×) が実験値で、実線の番号 (1)、(2)、(3)、(4)、(5)、(6) は計算値を示す。(Takagi *et al.*⁴⁾ より)

6-3 基板バイアス電圧と基板不純物濃度に関するユニバーサル性の検討

基板バイアス電圧を印加した場合の Si 反転層内移動度におよぼす効果について定性的に説明すると、図 6.7 に示すように Si 反転層表面のエネルギー状態は逆方向の基板バイアス電圧を加えると表面電界が強くなり電子はより狭い領域に閉じ込められ、フォノンと表面粗さによる散乱確率が増して移動度は低下する。一方、サブバンド間のエネルギー差が大きくなり、サブバンド $E_{0'}$ から E_0 へ電子の再分布が起こると、各サブバンドにおける電子移動度は導電質量 ($m_{c'} = 0.3147m_0$ 、 $m_c = 0.19m_0$) と有効状態密度質量 ($m_{d'} = 0.417m_0$ 、 $m_d = 0.19m_0$) の積に反比例するため移動度は増加することとなる。基板不純物濃度を高くすると Si 表面の電界が強くなり基板バイアス電圧を加えることと同じ効果がある。

実効電界 $E_{\text{eff}}=0.5\text{MV/cm}$ を一定とした時の基板バイアス電圧にたいするサブバンド E_0 と $E_{0'}$ における電子の占有率を図 6.8 に、室温における電子の閉じこめ量に相当する b_{mn} を図 6.9 に、液体窒素温度における b_{mn} を図 6.10 に示す。図 6.8 の実線は室温における電子の占有率を示し、基板バイアス電圧に対し約 10% の電子がサブバンド $E_{0'}$ からサブバンド E_0 へ再分布する。その結果、移動度が上昇する。一方、図 6.9 の b_{00} は一定で $b_{00'}$ と $b_{0'0'}$ は約 20% 低下するので、フォノンによる散乱確率が高くなり移動度が下がる。基板バイアス電圧の場合、両者の効果が打ち消しあって移動度が一定となっているものと思われる。図 6.8 の破線は液体窒素温度の電子占有率で基板バイアス電圧に関係無く 98% の電子がサブバンド E_0 に存在し、また、図 6.10 の b_{00} も一定であることから移動度が一定となることが分かる。

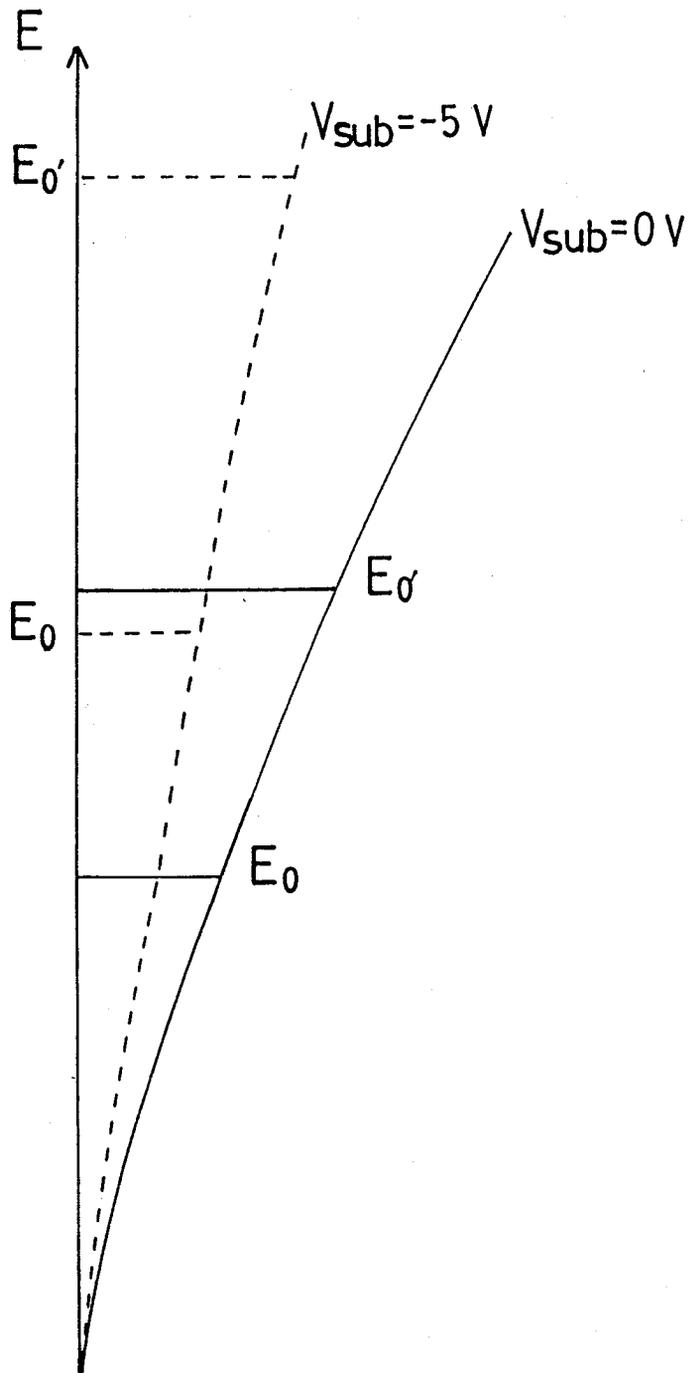


図 6.7 自己無撞着計算による基板バイアス電圧 $V_{\text{sub}} = 0 \text{ V}$ (実線) と $V_{\text{sub}} = -5 \text{ V}$ (破線) 印可した時の Si 表面反転層の伝導帯の底とサブバンドのエネルギー図。

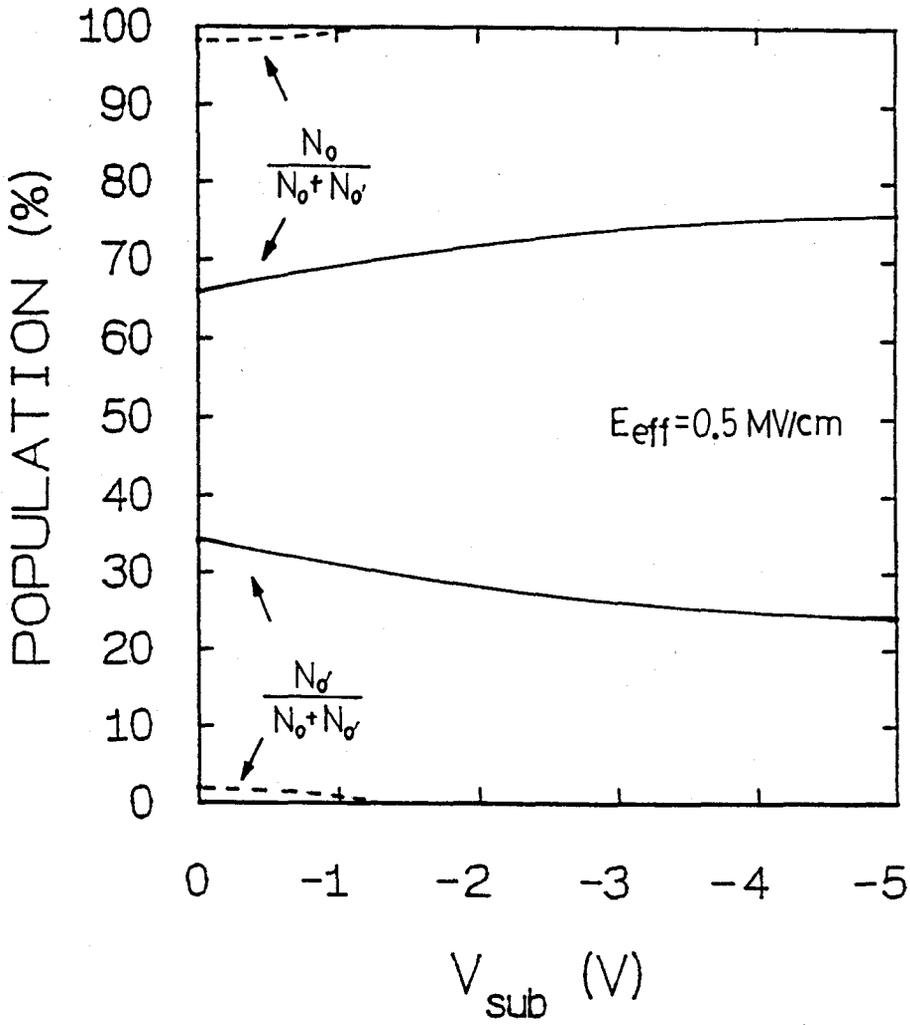


図 6.8 実効電界 0.5 MV/cm でサブバンド E_0 、 E_0' の基板バイアス電圧に対する電子占有率。実線は 300 K、破線は 77 K。

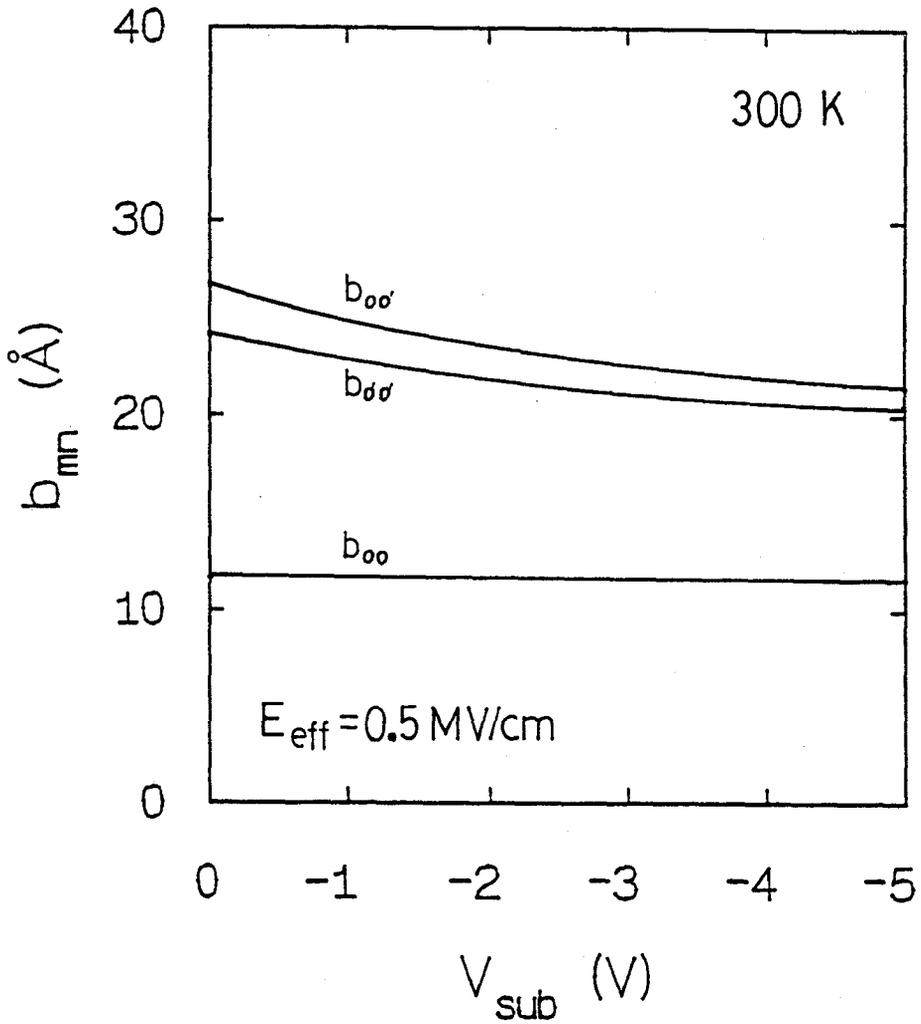


図 6.9 室温における実効電界 0.5 MV/cm の基板バイアス電圧に対する電子の閉じこめに相当する量 b_{mn} 。

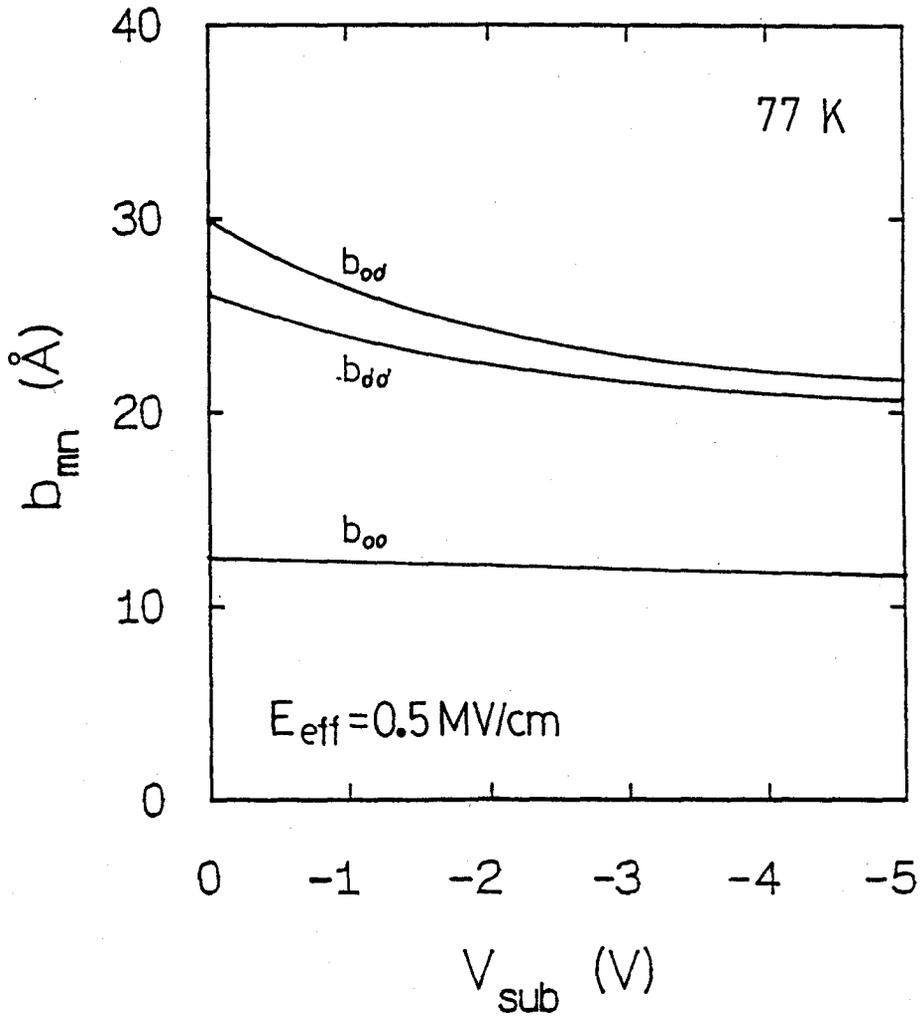


図 6.10 液体窒素温度における実効電界 0.5 MV/cm の基板バイアス電圧に対する電子の閉じこめに相当する量 b_{mn} 。

基板不純物濃度に関するユニバーサル性についても、実効電界を一定、 $E_{\text{eff}} = 0.5$ MV/cm、とした時の電子占有率を図 6.11 に示す。また、室温と液体窒素温度における電子の閉じこめ量に相当する b_{mn} をそれぞれ図 6.12 と 図 6.13 に示す。図 6.11 の実線は室温での、また破線は液体窒素温度での電子占有率を示し、不純物濃度の変化に対し室温では 35%、液体窒素温度では 10% の電子がサブバンド $E_{0'}$ から E_0 へ再分布している。電子の閉じこめ量 $b_{00'}$ と $b_{0'0'}$ に関しては室温では約 60%、液体窒素温度では約 75% 低下し、 b_{00} はどちらの温度とも不純物濃度の変化に対し一定である。室温における移動度の計算結果では、不純物濃度 $N_A = 7.7 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ で移動度がユニバーサル曲線から上昇しているのは $b_{00'}$ と $b_{0'0'}$ の影響よりも電子のサブバンド $E_{0'}$ から E_0 への再分布の影響が大きく効いているためと思われる。不純物濃度 $N_A = 2.4 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ で移動度がユニバーサル曲線から低下しているのは電子の再分布がなくなり、 $b_{00'}$ と $b_{0'0'}$ の低下が効いていることによるものと考えられる。液体窒素温度での計算結果では、不純物濃度が $N_A = 1.0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ 以下では電子の再分布と $b_{00'}$ と $b_{0'0'}$ の両者の効果が打ち消し合って移動度が一定となり、不純物濃度が $N_A = 1.0 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ 以上では電子の再分布がなくなり、 b_{00} も一定であるために移動度が一定となることが分かる。

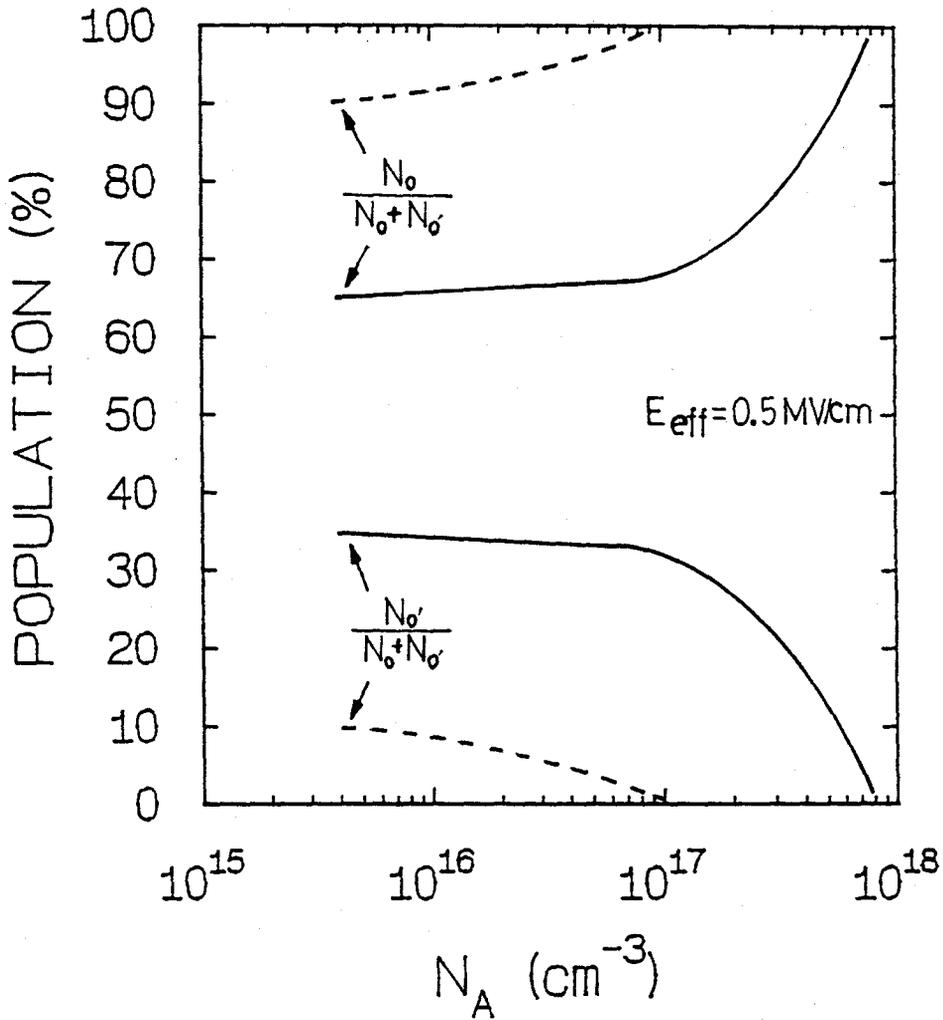


図 6.11 液体窒素温度における実効電界 0.5 MV/cm のサブバンド E_0 、 $E_{0'}$ の基板不純物濃度に対する電子占有率。実線は 300 K、破線は 77 K。

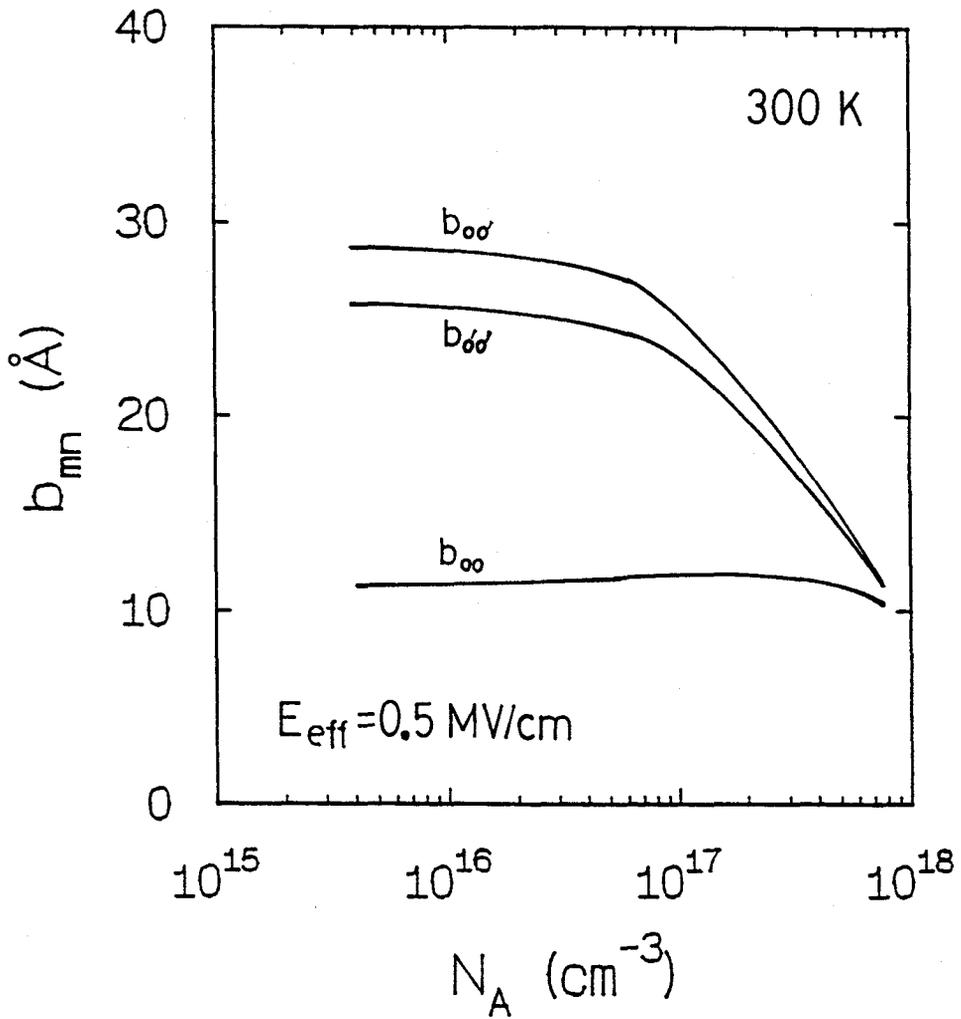


図 6.12 室温における実効電界 0.5 MV/cm の基板不純物濃度に対する電子の閉じこめに相当する量 b_{mn} 。

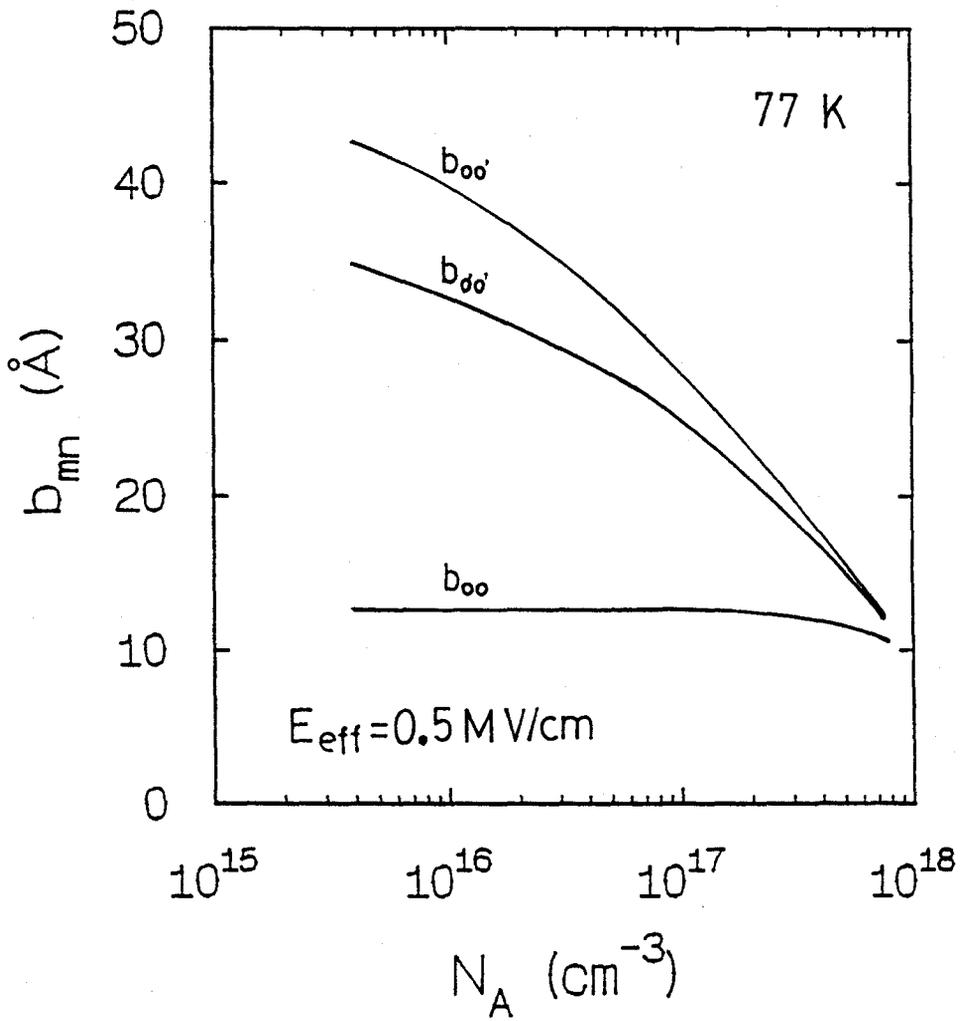


図 6.13 液体窒素温度における実効電界 0.5 MV/cm の基板不純物濃度に対する電子の閉じこめに相当する量 b_{mn} 。

6-4 結言

室温と液体窒素温度における基板バイアス電圧と基板不純物濃度に関するユニバーサル性について、実験結果と二次元電子ガスモデルを用いた計算結果とを併せて検討を行なった。その結果、

- 1) ユニバーサル性が成り立つのは音響フォノン、インターバレーフォノン、表面粗さ散乱が効いている領域で、ユニバーサル性からずれるのはクーロン散乱が効いている領域であることが計算結果からも裏付けられた。
- 2) 基板バイアス電圧と基板不純物濃度に関するユニバーサル性が成り立つのはサブバンド $E_{0'}$ から E_0 へ電子の再分布が 10 % 以内の場合に、電子の再分布による移動度の上昇と電子の閉じ込めが強くなることによる移動度の低下が打ち消し合うことで説明できる。

本章の参考文献

- 1) A. G. Sabnis and J. T. Clemens : *Int. Electron Device Meet. Tech. Dig.*
(IEEE, New York, 1979) p18.
- 2) S. C. Sun and J. D. Plummer : *IEEE Trans. Electron Devices*
ED-27 (1980) 1497.
- 3) J. T. Watt and J. D. Plummer : *Proc. Symp. VLSI Technol.* (1987) p81.
- 4) S. Takagi, M. Iwase and A. Toriumi : *Int. Electron Device Meet. Tech. Dig.*
(IEEE, New York, 1988) p398.
- 5) S. Takagi, M. Iwase and A. Toriumi : *Ext. Abs. of the 22th Conf.*
on Sol. St. Dev. and Mat., Tokyo, Japan, (1990) p275.
- 6) C. -L. Huang and G. Sh. Gildenblat : *IEEE Trans. Electron Devices*
ED-37 (1990) 1289.
- 7) C. G. Sodini, T. W. Ekstedt and J. L. Moll : *Solid-State Electron.* **25** (1982) 833.

第 7 章 結論

Si 反転層内における電子移動度の実験結果を 2DEG モデルに基づいて理論的な解析を行って次のような結論を得た。

(1) Si 反転層における二次元電子ガスの移動度に関する理論

これまでに Si 反転層の二次元電子ガスの移動度に関する理論計算は主に低温領域においてなされてきた。しかし、実際の MOSFETs の動作領域である 300 K 近辺での解析はなされていなかった。その理由はシリコンの伝導帯が多数バレー構造をしており、インターバレーフォノン散乱が支配的となるためその定式化を困難にしていたためである。本研究ではこれらの困難を取り除き、バルク半導体の電子-フォノン相互作用のパラメータを用いて MOS 反転層の電子移動度の解析を可能にした。主な成果は次の通りである

- (1.1) 高温領域において重要となる、音響フォノン、インターバレーフォノンおよび表面粗さによる散乱をとり入れた電子移動度が解析的に求められることを初めて明らかにし、移動度の解析式を導出した。
- (1.2) バルク Si で決定されたパラメータを用い、Si と Si 酸化膜界面の粗さのみをフィッティングパラメータとして決定した移動度を解析し、今回の測定結果やこれまでに報告されている実験結果を矛盾無く説明した。

(2) 実験結果の理論的解析

移動度の測定にはホール効果とコンダクタンス法の二つの方法を用いて室温と液体窒素温度で行った結果、この二つの方法で得た移動度の値はよく一致した。本研究での解析に用いた移動度のデータはコンダクタンス法を用いて測定した。Si 反転層内の電子移動度の理論的な解析モデルでは、電子の量子効果、Price のモデル に基づいた二

次元電子ガスとフォノンの相互作用、表面粗さ散乱、およびスクリーニングされたイオン化不純物散乱を考慮した。この移動度の解析から次のことが明かになった。

(2.1) 電子移動度の垂直電界依存性

(2.1.1) 高温では、低い垂直電界領域の移動度のゆるやかな低下はフォノン散乱における電子の閉じ込めによるもので、0.5 MV/cm 以上の高い垂直電界領域での大きい移動度の低下は表面粗さ散乱によるためである。

(2.1.2) 低温では、最初の移動度の立ち上がりはイオン化不純物散乱とそのスクリーニング効果でよく説明できて、その後の急激な移動度の低下は E_{eff}^{-2} 特性を持つ表面粗さ散乱によるものである。

(2.2) 電子移動度の温度依存性

(2.2.1) 100 K より低い温度において、反転電子密度が低い場合にはスクリーニング効果を考慮したイオン化不純物散乱が支配的である、反転電子密度が高くなると表面粗さ散乱で移動度が決まる。

(2.2.2) 100 K 以上の温度では反転電子密度に関係無く T^{-n} ($n > 1$) の特性となる。これは、音響フォノン散乱に加えてインターバレーフォノン散乱が効いてくるためであり、音響フォノンのみによる移動度は T^{-1} に比例し、インターバレーフォノン散乱のみの移動度は T^{-3} に近い特性を持つからである。

(2.3) 電子移動度のユニバーサル性

基板バイアス電圧や基板不純物濃度に関してユニバーサル性が成り立つのはサブバンド E_0' から E_0 への電子の再分布が 10 % 以内の場合、電子の再分布による移動度の上昇と電子の閉じ込めが強くなることによる移動度の低下が打ち消しあうことで説明できる。

謝辞

本研究は、大阪大学工学部電子工学科浜口智尋教授のご指導とご鞭撻のもとに行われたものであり、特に本研究テーマを与えて下さると共に、理論解析の詳細についてご討論をして下さったことに対し深く感謝致します。

本論文を作成するにあたり、ご指導とご高配を賜った大阪大学工学部吉野勝美教授、尾浦憲治郎教授、西原浩教授、裏克己教授、兎玉慎三教授に感謝の意を表します。

本研究を遂行するにあたり、有意義なご助言を頂いた大阪大学工学部電子工学科谷口研二助教授、森藤正人博士、実験に協力をしていただいた久保等氏にお礼申し上げます。また、二次元系の電子輸送に関してご討論をして下さった森伸也博士、松岡俊匡氏、修士論文を参考にさせて頂いた寺島郁氏、宮辻和郎氏、白畑正芳氏に感謝致します。大阪大学に滞在期間中、種々ご討論をして下さった浜口研究室の大学院生諸氏にも感謝致します。本研究に用いた MOSFET の試料を提供して頂いた東芝 ULSI 研究所の岩瀬政雄氏にお礼申し上げます。

終わりに、研究をする上で終始暖かく激励して下さった元阿南工業高等専門学校校長美馬源次郎博士（大阪大学名誉教授）ならびに元豊橋技術科学大学副学長西村正太郎博士（大阪大学名誉教授）にお礼申し上げます。浜口研究室に内地研究の機会を与えて下さった現阿南工業高等専門学校校長濱田實博士（大阪大学名誉教授）ならびに文部省にお礼申し上げます。研究する上でいろいろご配慮して頂いた阿南工業高等専門学校教授宮本俊助博士にお礼申し上げます。

・ [論文]

- (1) Kazuo MASAKI, Shunsuke MIYAMOTO : “Characteristic Grooves on GaAs by Anodization” Jpn.J.Appl.Phys. **24** (1985) pp.1376-1377.
- (2) Kazuo MASAKI, Shunsuke MIYAMOTO : “Carrier Concentration and Thickness Measurements of n-Type GaAs Epitaxial Layer by Cell Voltage in Anodization” Jpn.J.Appl.Phys. **25** (1986) pp.432-434.
- (3) Kazuo MASAKI, Chihiro HAMAGUCHI, Kenji TANIGUCHI and Masao IWASE : “Electron Mobility in Si Inversion Layers” Jpn.J.Appl.Phys. **28**(1989) pp.1856-1863.
- (4) Kazuo MASAKI, Kenji TANIGUCHI, Chihiro HAMAGUCHI and Masao IWASE : “Temperature Dependence of Electron Mobility in Si Inversion Layers” Jpn.J.Appl.Phys. **30**(1991) pp.2734-2739.
- (5) Kazuo MASAKI, Kenji TANIGUCHI and Chihiro HAMAGUCHI : “Electron Mobility in Si Inversion Layers” Semicond. Sci. Technol. **7**(1992) pp.B573-B575.

・ [国際会議]

Kazuo MASAKI, Kenji TANIGUCHI and Chihiro HAMAGUCHI : “Electron Mobility in Si Inversion Layers” *Seventh International Conference on Hot Carriers in Semiconductors (HCIS-7), Nara, 1991.*

・ [研究会、技術研究報告]

1. 正木和夫、宮本俊介、金田重男 : “n-GaAs の熱処理変換表面 p 形層の陽極酸化法によ

る評価とそのデバイスへの応用” 信学技報、ED81-76、1981年10月。

2. 正木和夫、宮本俊介：“陽極酸化による GaAs エピタキシャル層の評価”
信学技報、CPM82-20、1982年6月。
3. 正木和夫、宮本俊介：“光陽極酸化法による n 形 GaAs エピタキシャル層の不純物分布の推定” 信学技報、SSD82-137、1983年2月。
4. 正木和夫、宮本俊介：“多結晶 GaAs の粒界における陽極酸化” 信学技報、SSD85-163、1986年3月。
5. 正木和夫、谷口研二、浜口智尋、岩瀬政雄：“Si 反転層内電子移動度の温度依存性” 信学技報、SDM89-155、1989年12月。
6. 正木和夫、谷口研二、浜口智尋：“Si 反転層内移動度の半実験式” 信学技報、SDM89-156、1989年12月。
7. 正木和夫、谷口研二、浜口智尋、岩瀬政雄：“Si 反転層内移動度のユニバーサル性” 信学技報、SDM90-160、1990年12月。
8. 浜口智尋、谷口研二、正木和夫、中村 寛、安田直樹：“Si 表面反転層中の高電界伝導現象” 第1回ワーク・ショップ Si-SiO₂系の物理 1989年1月18日於東京大学。

・[阿南工業高等専門学校 研究紀要]

1. 正木和夫、宮本俊介：“陽極酸化による GaAs 表面荒れの結晶方向依存性” 20 (1984) 67.
2. 正木和夫、宮本俊介：“陽極酸化により GaAs 表面上に発生する grove の原因検討 (1)” 22 (1986) 27.

・[学会発表]

(応用物理学会)

1. 正木和夫、宮本俊介：“Al-GaAs 系陽極酸化による MOS ダイオードの C-V 特性について” 昭和五十四年度日本物理・応用物理学会中国四国支部例会。
2. 正木和夫、宮本俊介：“Al-GaAs の陽極酸化について” 昭和五十五年度日本物理・応用物理学会中国四国支部例会。
3. 正木和夫、宮本俊介、金田重男：“陽極酸化の光応答による GaAs 表面熱変成層の評価” 第 29 回応用物理学関係連合講演会、1982 年 4 月。
4. 正木和夫、宮本俊介：“陽極酸化によるエッチピット密度と過剰電圧の関係” 第 30 回応用物理学関係連合講演会、1983 年 4 月。
5. 正木和夫、宮本俊介：“陽極酸化により GaAs 表面に発生する groove の結晶方向依存性” 第 31 回応用物理学関係連合講演会、1984 年 4 月。
6. 正木和夫、宮本俊介：“多結晶 GaAs の粒界における陽極酸化” 第 33 回応用物理学関係連合講演会、1986 年 4 月。
7. 正木和夫、谷口研二、浜口智尋、三橋順一：“n チャネル MOSFET の一軸性応力効果” 48 第回応用物理学会学術講演会、1987 年 10 月。
8. 正木和夫、谷口研二、浜口智尋、三橋順一：“二次元電子ガスモデルを考慮した n-MOSFET の一軸性応力下における実効移動度” 第 35 回応用物理学関係連合講演会、1988 年 3 月。
9. 正木和夫、谷口研二、浜口智尋、三橋順一：“Si-MOSFET の実効移動度におよぼす一軸性応力効果” 第 49 回応用物理学会学術講演会、1988 年 10 月。
10. 正木和夫、谷口研二、浜口智尋：“Si 反転層内電子移動度の垂直電界依存性” 第 36 回

応用物理学関係連合講演会、1989年4月。

11. 正木和夫、谷口研二、浜口智尋、岩瀬政雄：“Si 反転層内電子移動度の温度依存性” 第50回応用物理学会学術講演会、1989年9月。
12. 正木和夫、谷口研二、浜口智尋：“Si 反転層内移動度のユニバーサル曲線” 第37回応用物理学関係連合講演会、1990年3月。
13. 正木和夫、谷口研二、浜口智尋、岩瀬政雄：“Si 反転層内移動度の基板バイアス効果” 第51回応用物理学会学術講演会、1990年9月。
14. 正木和夫、谷口研二、浜口智尋：“Si 反転層内移動度のユニバーサル性” 第38回応用物理学関係連合講演会、1991年3月。

(電気関係学会)

1. 正木和夫、宮本俊介：“ショットキー障壁接合界面に局在する単一準位のトラップのV-C⁻²特性への影響” 昭和五十三年度電気関係学会四国支部連合大会。
2. 正木和夫、宮本俊介：“Al-GaAlAs-GaAs系の酸化膜形成” 昭和五十四年度電気関係学会四国支部連合大会。
3. 正木和夫、藤枝善裕、宮本俊介：“Al-GaAsショットキー障壁構造の陽極酸化” 昭和五十五年度電気関係学会四国支部連合大会。
4. 正木和夫、宮本俊介、志磨誠一、吉田博昭、原田和典：“熱処理変換されたGaAsにおけるp型層の陽極酸化法による評価” 昭和五十六年度電気関係学会四国支部連合大会。
5. 正木和夫、小林康典、多田秀信、谷村英樹、宮本俊介：“陽極酸化の光応答によるGaAsエピタキシャル層の評価” 昭和五十七年度電気関係学会四国支部連合大会。
6. 正木和夫、宮本俊介：“陽極酸化によるGaAs表面荒れの結晶方向依存性” 昭和五十八

年度電気関係学会四国支部連合大会.

7. 正木和夫、宮本俊介：“GaAs 陽極酸化膜上の Al 帯の electro migration” 昭和五十九年度電気関係学会四国支部連合大会.
8. 正木和夫、宮本俊介：“多結晶 GaAs の粒界における陽極酸化について” 昭和六十年年度電気関係学会四国支部連合大会.
9. 正木和夫、宮本俊介：“陽極酸化法により GaAs 表面に発生する groove の原因検討” 昭和六十年年度電気関係学会四国支部連合大会.
10. 正木和夫、宮本俊介：“多結晶 GaAs の粒界における陽極酸化(2)” 昭和六十一年度電気関係学会四国支部連合大会.
11. 正木和夫、宮本俊介：“陽極酸化法による GaAs 結晶基板加工層下の傷の検出について” 昭和六十二年度電気関係学会四国支部連合大会.
12. 正木和夫、宮本俊介：“GaAs 基板表面に発生する groove の化学作用” 昭和六十三年度電気関係学会四国支部連合大会.
13. 正木和夫、谷口研二、浜口智尋：“Si MOSFET 反転層内移動度の半実験式” 平成元年度電気関係学会四国支部連合大会.
14. 正木和夫、大上浩史、齊藤高広、鶴峯義之、橋立勝之、藤沢哲也、谷口研二、浜口智尋、岩瀬政雄：“Si 反転層内移動度の基板バイアス電圧とユニバーサル曲線” 平成二年度電気関係学会四国支部連合大会.
15. 正木和夫、大上浩史、橋立勝之、谷口研二、浜口智尋：“縮退を考慮した Si 反転層内の移動度” 平成三年度電気関係学会四国支部連合大会.