

神戸大学大学院 工学研究科 電気電子工学専攻

---

# 集積化デバイス工学

---

(光デバイス工学特論テキスト)

2011年9月 改訂

土屋 英昭

(ナノ構造エレクトロニクス研究室)

<http://www.research.kobe-u.ac.jp/eng-nanoelectronics/>

# 内 容

## 第 1 章 量子力学の復習

### 1.1 基本原理

相補性原理とド・ブROI波長、対応原理、シュレディンガー方程式、固有値・固有関数、エルミート演算子、交換関係、不確定性原理、エーレンフェストの定理、確率流密度、パウリの排他律

### 1.2 量子力学的効果

エネルギー量子化、トンネル効果、トランスファー・マトリックス法

## 第 2 章 バンド理論

### 2.1 周期格子中の電子とブロッホの定理

### 2.2 クローニヒ・ペニーモデル

### 2.3 経験的擬ポテンシャル法

並進対称性、逆格子ベクトル、第一ブリルアンゾーン、シュレディンガー方程式の平面波展開表示、空格子バンド、2 波近似、経験的擬ポテンシャル、代表的な半導体のバンド構造

### 2.4 伝導帯最下端のバンド構造と有効質量近似

付録 A: ブロッホ振動

付録 B: 経験的擬ポテンシャル法ソースプログラム

## 第 3 章 第一原理計算法 (「ナノエレクトロニクスの基礎」)

### 3.1 断熱近似

### 3.2 一電子近似

ハートレー・フォック法、密度汎関数法、局所密度近似、コーン・シャム方程式、交換相関ポテンシャル、平面波展開法、カー・パリネロ法(第一原理分子動力学法)

### 3.3 シリコンナノ構造への適用例

ナノスケールシリコン薄膜の電子状態解析、シリコンナノワイヤの電子状態解析

## 第 4 章 ナノ構造の物理

### 4.1 ナノ構造の電子密度と電流密度

$k$  空間の状態密度、3 次元/2 次元/1 次元電子密度、フェルミ・ディラック積分、閉じ込め次元とエネルギー状態密度

### 4.2 ツ・エサキの電流式

### 4.3 ランダウアー・ビュティカーの式

コンダクタンスの量子化

### 4.4 バリスティック MOSFET の名取モデル

付録: 名取モデル式の導出

## 第 5 章 ナノ MOS トランジスタ

### 5.1 ムーアの法則 (MOSFET のスケールリング則)

### 5.2 MOSFET の動作原理

### 5.3 Dennard Scaling (比例縮小則)

#### 5.4 微細化に伴い出現する様々な物理現象

短チャンネル効果、離散不純物揺らぎ、量子力学的効果、バリスティック輸送

#### 5.5 テクノロジー・ブースター

サブバンド構造変調効果(ひずみ Si/超薄膜 SOI 構造による量子化サブバンド制御)、マルチゲート構造、ショットキーMOSFET、高移動度チャンネル MOSFET (Ge/III-V 族チャンネル/カーボンナノチューブ/グラフェン等)

#### 5.6 新原理・新概念トランジスタ

トンネル FET、I-MOS、ジャンクションレストランジスタ

付録 A: 移動度ユニバーサル曲線

付録 B: 反転層キャリアの量子化

付録 C: 反転層容量

付録 D:  $kT$ -レイヤ理論

付録 E: フラックス法による後方散乱確率の導出

#### 講義資料のダウンロード

「電気電子工学科 HP (<http://www.eedept.kobe-u.ac.jp>)」→「教職員一覧」→「土屋英昭」→「講義」  
→「光デバイス工学特論」→「講義資料」

#### 参考書

三好且六、小川真人、土屋英昭、「ナノエレクトロニクスの基礎」、培風館(2007).

# 1 章 量子力学の復習

## 1.1 基本原理

### 1.1.1 相補性原理とド・ブROI波長

相補性原理(complementarity)とは、「電子、光、原子等のミクロな物質は粒子であるとともに波でもある」という粒子・波動二重性を表す原理である。粒子とは運動量  $p$  と運動エネルギー  $E$  をもって運動する物質を意味し、これに対して、波とは波数  $k$  と角周波数  $\omega$  で伝搬する波動を意味する。つまり相補性原理は、ミクロな物質がこれら相反する性質を持つ物質であることを表しており、粒子と波の運動変数を対応させる次の 2 式が成り立つと仮定する。

$$E = \hbar\omega \quad , \quad p = \hbar k = \frac{h}{\lambda} \quad (1.1)$$

上式の  $\lambda$  をド・ブROI波長(de Broglie wavelength)とよぶ。相補性原理では、巨視的あるいは時間平均的な性質に関しては波動的振舞いを示し、微視的な光やフォノンの吸収や放出に関しては粒子的に振舞うと解釈している。

ド・ブROI波長の大きさは、およそ次のような形で見積もられる。

(1)  $p = mv$  と組み合わせて、

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} \quad (1.2)$$

ただし、 $m$  は粒子の質量、 $E$  は電子のエネルギーを表す。

(2) 特に、 $E = 3k_B T / 2$  (熱平衡状態(電圧ゼロ))のド・ブROI波長を熱的ド・ブROI波長とよび、

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{3mk_B T}} \quad (1.3)$$

と表す。

どちらの場合でも、電子の質量  $m$  が軽いほどド・ブROI波長が長くなることがわかる。

[問題 1.1] GaAs と Si に対する (1)  $E = 1\text{eV}$  の電子のド・ブROI波長、(2)  $T = 300\text{K}$  の電子の熱的ド・ブROI波長を計算せよ。

### 1.1.2 対応原理

式(1.1)から分かるように、 $\hbar \equiv h/2\pi$  ( $h$ :プランク定数)は、粒子的性質と波動的性質をつなげる重要な役割をしている。この  $\hbar$  は、後述する位置と運動量の間や、時間とエネルギーの間の不確定性の度合いを決めている。さらに、参考書「ナノエレクトロニクスの基礎」の 6 章で述べられているように、ウイグナーの量子輸送方程式の  $\hbar \rightarrow 0$  の極限が、古典的ボルツマン方程式に一致することが示されている。

このように  $\hbar$  は、量子力学の基本原則において中心的役割をしており、 $\hbar \rightarrow 0$  とする極限を古典的極限とよぶ。この極限の下では、量子力学の結果が古典力学に一致する。これを対応原理(correspondence principle)とよんでいる。

### 1.1.3 シュレディンガー方程式

波としての電子の振舞いを支配するシュレディンガー方程式を導出する。ド・ブROI波を表す関数  $\varphi$  を  $e^{-i(\omega t - kx)}$  と表す。この関数  $\varphi$  の満たすべき方程式は、

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = ik\varphi \quad (1.4a)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -i\omega\varphi \quad (1.4b)$$

である。まず式(1.4a)に式(1.1)の関係をを用いると、

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = ik\varphi = \frac{i}{\hbar} p\varphi \quad (1.5)$$

より

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad (1.6)$$

と置き換えられることが分かる。したがって、 $\varphi$ に $p^2$ を作用させた場合は、

$$p^2\varphi = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \quad (1.7)$$

となる。一方、式(1.4b)に式(1.1)の関係をを用いると、

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -i\omega\varphi = -\frac{i}{\hbar} E\varphi \quad (1.8)$$

より

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (1.9)$$

と置き換えられることが分かる。

したがって、ポテンシャルエネルギー $V$ による外力が加わっている場合は、粒子の全エネルギー $E$ が

$$E = \frac{p^2}{2m} + V$$

となるため、

$$E\varphi = \left( \frac{p^2}{2m} + V \right) \varphi$$

で、運動量演算子(1.6)とエネルギー演算子(1.9)を用いると、次の波動方程式が導かれる。

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + V\varphi \quad (1.10)$$

これを3次元に拡張すると

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi + V(\mathbf{r})\varphi \quad (1.11)$$

となり、これを(時間に依存する)シュレディンガー方程式とよぶ。上式の右辺をハミルトニアン $H$ を導入して

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \quad (1.12)$$

と表すと、シュレディンガー方程式(1.11)は簡単に

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = H\varphi \quad (1.13)$$

と書くことができる。

### 1.1.4 時間に依存しないシュレディンガー方程式

固体電子論では、通常、時間に依存しないシュレディンガー方程式を解くことになる。すなわち、式(1.11)の波動関数  $\varphi$  を変数分離して  $\varphi(\mathbf{r}, t) = R(\mathbf{r})T(t)$  と表し、この  $R(\mathbf{r})$  に対する微分方程式が重要な役割を果たす。

実際に  $\varphi(\mathbf{r}, t) = R(\mathbf{r})T(t)$  を式(1.11)に代入し、その両辺を  $R(\mathbf{r})T(t)$  で割ると

$$ih \frac{1}{T(t)} \frac{\partial T(t)}{\partial t} = \frac{1}{R(\mathbf{r})} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) R(\mathbf{r}) = \varepsilon \text{ (定数)} \quad (1.14)$$

となる。ここで上式の第一式は時間  $t$  のみの関数で、一方、第二式は位置  $\mathbf{r}$  のみの関数となっていて、それらが等しくなるためには、両者とも定数である必要がある。式(1.14)ではこの定数を  $\varepsilon$  とおいている。したがって式(1.14)より、次の二式が導かれる。

$$ih \frac{\partial T(t)}{\partial t} = \varepsilon T(t) \quad (1.15)$$

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) R(\mathbf{r}) = \varepsilon R(\mathbf{r}) = HR(\mathbf{r}) = \varepsilon R(\mathbf{r}) \quad (1.16)$$

式(1.15)からは  $T(t) = T_0 e^{-i(\varepsilon/\hbar)t}$  と求まり、波動関数は  $\varepsilon/\hbar$  の角周波数で振動する成分を持つことが分かる。一方、式(1.16)はハミルトニアン  $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$  を与え、固有値  $\varepsilon$  と固有関数  $R(\mathbf{r})$  を求める固有値方程式となっている。この式(1.16)を時間に依存しないシュレディンガー方程式と呼んでいる。以下の節において、固有値  $\varepsilon$  と固有関数  $R(\mathbf{r})$  の物理的な意味について説明する。

### 1.1.5 波動関数の物理的意味(ボルン解釈)

波動関数  $\varphi(\mathbf{r}, t)$  の物理的意味は、ボルン解釈(Born interpretation)では次のように解釈されている。

「位置  $\mathbf{r}$  を含む体積要素  $d\mathbf{v}$  の中に粒子を見出す確率は  $\varphi^* \varphi d\mathbf{v}$  で与えられる。それを全空間で積分すると 1 となる。」

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^* \varphi d\mathbf{v} = 1 \quad (\text{波動関数の規格化(normalization)という}) \quad (1.17)$$

ここで、 $\varphi^*$  は  $\varphi$  の複素共役(complex conjugate)であり(波動関数は一般に、複素数値をとる)、 $\varphi^* \varphi = |\varphi|^2$  を確率密度(probability density)とよぶ。式(1.17)は、波動関数の絶対値の2乗が積分可能でなければならないことを意味しており、したがって、波動関数は無限遠でゼロにならなければならないことを課している。

### 1.1.6 固有値の物理的意味

一般に、状態  $\varphi$  において観測した演算子  $\mathbf{A}$  の期待値(expectation value)は、次式で計算される。

$$\langle \mathbf{A} \rangle = (\varphi, \mathbf{A}\varphi) = \int \varphi^* \mathbf{A}\varphi d\mathbf{v} \quad (1.18)$$

上式に従って、時間に依存しないシュレディンガー方程式のエネルギー期待値を計算すると

$$\langle H \rangle = \int R^* H R d\mathbf{v} = \varepsilon \int R^* R d\mathbf{v} = \varepsilon \quad (1.19)$$

となり、シュレディンガー方程式の固有値は系のエネルギー期待値を表すことが分かる。

### 1.1.7 エルミート演算子

粒子の運動量やエネルギーなどの実測可能な物理量は、数学的には実数で表現される。1.1.6 で示したように、シュレディンガー方程式の固有値はエネルギー期待値を表すことから、その固有値は実数にならなければならない。このように、シュレディンガー方程式の固有値が実数となるためには、ハミルトニアン  $H$  はエルミート演算子(Hermite operator)である必要がある。

エルミート演算子の定義は次式で与えられる。

$$\int \varphi^* \mathbf{A} \psi d\mathbf{v} = \int (\mathbf{A} \varphi)^* \psi d\mathbf{v} \quad (1.20)$$

いま、式(1.19)の関係を使ってその複素共役をとると

$$\varepsilon^* = \left[ \int R^* H R d\mathbf{v} \right]^* = \int R H^* R^* d\mathbf{v} = \int (H R)^* R d\mathbf{v} = \int R^* H R d\mathbf{v} = \varepsilon \quad (1.21)$$

↑エルミート演算子の定義式(1.20)を使う

となることから、ハミルトニアン  $H$  がエルミート演算子であれば、その固有値  $\varepsilon$  は実数となることが保証される。

**[問題 1.2]** 次の演算子がエルミート演算子であることを示しなさい。

$$(1) p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$(2) H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

### 1.1.9 交換関係 (commutation relation)

物理量  $A$  ( $=\langle \mathbf{A} \rangle$ )、 $B$  ( $=\langle \mathbf{B} \rangle$ ) に対応する演算子  $\mathbf{A}$ 、 $\mathbf{B}$  の間の交換子を

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA} \quad (1.22)$$

で定義する。 $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0$  が成り立つとき、演算子  $\mathbf{A}$  と  $\mathbf{B}$  は可換であるという。この場合には、2つの物理量  $A$  と  $B$  が同時に確定値を有する状態が存在する。

一方、 $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] \neq 0$  のときには、 $A$  が確定値をとったとき  $B$  は確定値をとることは許されない。位置と運動量、および時間とエネルギーの間には、このような非可換な関係が存在し、次項で述べる不確定性原理が生じる原因となる。

**[問題 1.3]** 次の交換関係を証明せよ。

$$(1) [x, p_x] = [y, p_y] = [z, p_z] = i\hbar \quad (1.23)$$

$$(2) [x, p_y] = [x, p_z] = [y, p_x] = \dots = 0 \quad (1.24)$$

$$(3) [t, E] = -i\hbar \quad (1.25)$$

### 1.1.10 不確定性原理 (uncertainty principle)

前項で述べたとおり、ある方向の位置  $x$  とそれに対応する運動量  $p_x$  は非可換であるため、これら2つの物理量は同時に確定値をもつことはできない。これを表す数学的表現は次のようになる。

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.26)$$

上式の導出は次のようにして行う。式(1.18)の期待値の式を用いると、位置と運動量の測定値の不確定度は次にように与えられる。

$$\begin{aligned} (\Delta x)^2 (\Delta p_x)^2 &= \int \varphi^* (x - \langle x \rangle)^2 \varphi \, dv \cdot \int \varphi^* (p_x - \langle p_x \rangle)^2 \varphi \, dv \\ &= \int [(x - \langle x \rangle) \varphi]^* (x - \langle x \rangle) \varphi \, dv \cdot \int [(p_x - \langle p_x \rangle) \varphi]^* (p_x - \langle p_x \rangle) \varphi \, dv \end{aligned} \quad (1.27)$$

ここで、任意の実数  $\lambda$  についての次の2次恒不等式を考える。

$$\int \{[\lambda(x - \langle x \rangle) + i(p_x - \langle p_x \rangle)] \varphi\}^* [\lambda(x - \langle x \rangle) + i(p_x - \langle p_x \rangle)] \varphi \, dv \geq 0 \quad (1.28)$$

上式の左辺を展開し  $\lambda$  についてのべき数でまとめると

$$\begin{aligned} \lambda^2 \int \{(x - \langle x \rangle) \varphi\}^* (x - \langle x \rangle) \varphi \, dv \\ + \lambda i \left[ \int \{(x - \langle x \rangle) \varphi\}^* (p_x - \langle p_x \rangle) \varphi \, dv - \int \{(p_x - \langle p_x \rangle) \varphi\}^* (x - \langle x \rangle) \varphi \, dv \right] \\ + \int \{(p_x - \langle p_x \rangle) \varphi\}^* (p_x - \langle p_x \rangle) \varphi \, dv \geq 0 \end{aligned} \quad (1.29)$$

となり、上式が任意の  $\lambda$  の値に対して成立するためには、その判別式  $\leq 0$  の条件をつかって

$$\begin{aligned} - \left[ \int [(x - \langle x \rangle) \varphi]^* (p_x - \langle p_x \rangle) \varphi \, dv - \int [(p_x - \langle p_x \rangle) \varphi]^* (x - \langle x \rangle) \varphi \, dv \right]^2 \\ - 4 \int [(x - \langle x \rangle) \varphi]^* (x - \langle x \rangle) \varphi \, dv \cdot \int [(p_x - \langle p_x \rangle) \varphi]^* (p_x - \langle p_x \rangle) \varphi \, dv \leq 0 \end{aligned} \quad (1.30)$$

上式の左辺第2項は式(1.27)に対応しており  $-4(\Delta x)^2 (\Delta p_x)^2$  となる。一方、左辺第1項は展開し、 $p_x$  がエルミート演算子であることを使うと、式(1.30)は次のようになる。

$$4(\Delta x)^2 (\Delta p_x)^2 \geq - \left[ \int \varphi^* (xp_x - p_x x) \varphi \, dv \right]^2 \quad (1.31)$$

上式の右辺に式(1.23)の交換関係  $[x, p_x] = i\hbar$  を代入すると、式(1.26)の不確定性の関係が導かれる。

同様にして、演算子が  $x$  と  $p_y$  のように可換であるときには、 $\Delta x \cdot \Delta p_y \geq 0$  となり不確定性が存在しないことがわかる。

また、時間とエネルギーの間にも式(1.25)の交換関係を使うと、

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.32)$$

の不確定性があることが示される。

[問題 1.4] 式(1.30)から式(1.31)を導出せよ。

### 1.1.11 エーレンフェストの定理: 量子力学と古典力学の対応を示す (Ehrenfest's theorem)

粒子の位置決定に相当程度の誤差を許せば、粒子の運動はその誤差程度の拡がりをもった確率波の波束で表され、その波束の重心の運動は、粒子が古典力学に従うとした場合の運動に一致する。

粒子の位置  $x$  の期待値  $\langle x \rangle$  の時間変化を考える。式(1.13)および(1.12)を使って、



$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \langle x \rangle &= \frac{d}{dt} \int \varphi^* x \varphi d\mathbf{v} = \int \left( \frac{d\varphi^*}{dt} x \varphi + \varphi^* x \frac{d\varphi}{dt} \right) d\mathbf{v} \\
&= \frac{1}{i\hbar} \int [\varphi^* x H \varphi - (H^* \varphi^*) x \varphi] d\mathbf{v} \\
&= \frac{i\hbar}{2m} \int [\varphi^* \nabla^2(x\varphi) - (\nabla^2 \varphi^*) x \varphi] d\mathbf{v} + \frac{1}{m} \int \varphi^* \left( -i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) d\mathbf{v}
\end{aligned} \tag{1.33}$$

となる。ここで、 $t$ と $x, y, z$ は独立であるから、 $t$ についての微分を積分の中に入れて先に行っても良い。また次の関係を使った。

$$\nabla^2(x\varphi) = x\nabla^2\varphi + 2\frac{\partial \varphi}{\partial x} \tag{1.34}$$

式(1.33)の右辺第1項にグリーンの定理を適用すると

$$\frac{i\hbar}{2m} \int_V [\varphi^* \nabla^2(x\varphi) - (\nabla^2 \varphi^*) x \varphi] d\mathbf{v} = \frac{i\hbar}{2m} \int_S [\varphi^* \nabla(x\varphi) - x \varphi \nabla \varphi^*] d\mathbf{S} \tag{1.35}$$

となる。ここで、右辺の閉曲面を十分遠方にとると、波動関数は無限遠でゼロにならないといけないため(ボルン解釈)、式(1.35)の右辺はゼロになる。したがって式(1.33)より、

$$m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \int \varphi^* \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) d\mathbf{v} = \langle p_x \rangle \tag{1.36}$$

が得られる。さらにもう一度、式(1.36)を時間微分すると

$$\begin{aligned}
m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle &= \frac{d}{dt} \int \varphi^* \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) d\mathbf{v} = \frac{\hbar}{i} \int \left( \frac{\partial \varphi^*}{\partial t} \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \varphi^* \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t \partial x} \right) d\mathbf{v} \\
&= \int \left[ H^* \varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \varphi^* \frac{\partial}{\partial x} (H\varphi) \right] d\mathbf{v} \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \int \left[ (\nabla^2 \varphi^*) \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \varphi^* \nabla^2 \left( \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \right] d\mathbf{v} + \int \varphi^* \left( -\frac{\partial V}{\partial x} \right) \varphi d\mathbf{v}
\end{aligned} \tag{1.37}$$

となる。前と同様に、式(1.37)の右辺第1項にグリーンの定理を適用し、表面積分の閉曲面を十分遠方にとるとゼロになるので、結局、式(1.37)から

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = \int \varphi^* \left( -\frac{\partial V}{\partial x} \right) \varphi d\mathbf{v} = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle = \langle F_x(\mathbf{r}) \rangle \tag{1.38}$$

が得られる。上式の右辺は、粒子に働く力の $x$ 成分の期待値である。

以上をまとめると以下の2式が得られたことになる。

$$m \frac{d \langle x \rangle}{dt} = \langle p_x \rangle$$

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = \langle F_x(\mathbf{r}) \rangle$$

これらは、期待値で表した各量が古典的なニュートンの運動方程式(Newton's equation of motion)を満たしていることを示している(図 1.1)。もし、ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ の変化が波動関数 $\varphi$ の変化に比べて十分に緩やかであるならば、

$$\langle F_x(\mathbf{r}) \rangle = \int \varphi^* F_x(\mathbf{r}) \varphi d\mathbf{v} \approx F_x(\langle \mathbf{r} \rangle) \int \varphi^* \varphi d\mathbf{v} = F_x(\langle \mathbf{r} \rangle) \tag{1.39}$$

のように、波束の重心 $\langle \mathbf{r} \rangle$ における力で置き換えて表現することができる。

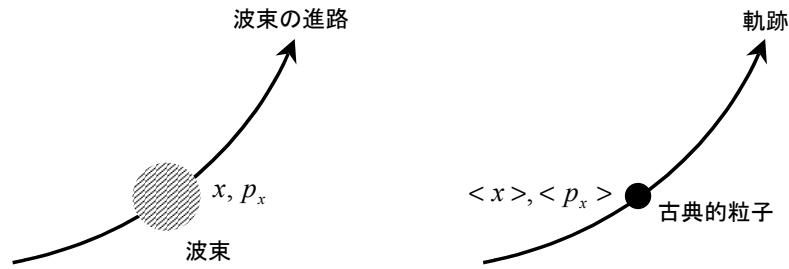


図 1.1 エーレンフェストの定理. ポテンシャルの変化が緩やかならば、波束の重心の運動経路は古典的粒子として求めた軌道に一致する。

### 1.1.12 確率流密度

1.1.5 ボルン解釈で定義した確率密度  $\rho \equiv \psi^* \psi = |\psi|^2$  の時間変化を考える。式(1.13)および(1.12)を使うと、確率密度の時間変化は次式で与えられる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) \quad (1.40)$$

粒子の生成・消滅過程や散乱による軌道変化がない場合には、確率密度は常に保存されていなければならない。これを保証するために、式(1.40)が次の連続の式を満たすように確率流密度  $\mathbf{S}$  (probability current density) を定義する。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{S} = 0 \quad (1.41)$$

このとき、確率流密度  $\mathbf{S}$  は次式で与えられる。

$$\mathbf{S} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \nabla \psi) \quad (1.42)$$

4 章で詳しく述べるように、バリスティック輸送下でのナノ構造の重要な電流式(ツ・エサキの電流式、ランダウア・ビュティカーの式、バリスティック MOSFET 名取モデル)は式(1.42)の確率流密度から定式化される。この他、確率流密度はヘテロ界面での波動関数の境界条件を決める際にも用いられており、ナノ構造の物理を理解する上で重要な役割を担っている(1.2.2 トンネル効果を参照のこと)。

[問題 1.5] 式(1.42)の確率流密度が連続の式(1.41)を満足することを確認せよ。必要ならば、次のベクトル公式を用いること。  $\nabla \cdot (\phi \mathbf{A}) = \phi \nabla \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla \phi$

[問題 1.6] 平面波  $\psi = Ae^{ikx}$  に対する確率流密度  $S_x$  の表現を計算せよ。

### 1.1.13 パウリの排他律 (以上は電子が 1 個の場合. 電子が 2 個以上になるとパウリの排他律が働く)

量子力学は、電子の数が 2 個以上になると途端に複雑になる。すなわち、解くことが難しくなる。その理由は、パウリの排他律と電子間のクーロン相互作用が働くことによる。パウリの排他律(Pauli's exclusion principle)とは、電子などのフェルミ粒子は、1つの状態にはただ一つの粒子しか存在できないことを意味する。本項では、パウリの排他律がフェルミ粒子のみに作用することを講述する。まず粒子の統計性から話を始める。

## 粒子の統計性

古典統計では、各粒子を識別可能として各エネルギー状態への分配を行うこととする。これは、古典論では粒子の大きさが目に見えるほどの大きさをもつため、識別が可能だということによる。しかし固体を構成する電子や陽子の大きさは極めて小さく、我々人間が識別することは不可能とするのが自然な考え方である。フェルミ分布やボーズ分布といった量子統計分布では、このように同じ種類の粒子は区別できないと考えて粒子の分配を行っていく。これが量子統計と古典統計との本質的な違いである。それではまず、最も基本的な2粒子系を取り上げ、量子力学的な粒子は、ボーズ粒子とフェルミ粒子という2種類の粒子に分類されることから議論を始める。

### フェルミ粒子とボーズ粒子

二つの同じ種類の粒子の位置を  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$  とする。このとき、全波動関数  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  は次の時間に依存しないシュレディンガー方程式を満たすとす。

$$H\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (1.43)$$

二粒子系の全波動関数  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  のイメージを図 1.2 に示している。ここで粒子の位置  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$  は、お互いの影響が感じられる程度の距離だけ離れているとする。量子力学的には同じ種類の粒子は区別できないので、2つの粒子の位置  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$  を交換させても系の状態は変わらないはずである(波動関数の符号が変わらないと言っている訳ではない!)。つまり、式(1.43)と同じく

$$H\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = E\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \quad (1.44)$$

が成り立つことになる。式(1.43)と(1.44)は、同じ固有値  $E$  を持つことから、波動関数は定数倍  $a$  だけ異なっても良い。すなわち、

$$\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = a\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (1.45)$$

と書くことができる。この式(1.45)が成り立つということは、これを式(1.44)に代入すれば式(1.43)が得られることから明らかである。式(1.45)の関係は、2つの粒子の位置を交換すると波動関数の係数が  $a$  だけ変化することを意味しており、これより粒子の位置の交換を2度行うと

$$\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = a\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = a^2\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \quad (1.46)$$

となる。したがって係数  $a$  の条件として  $a^2 = 1$  となることから、結局

$$a = \pm 1 \quad (1.47)$$

の2通りの係数を取ることができる。つまり、識別が不可能という前提の下で、量子力学的粒子の波動関数は次の2種類に分類されることが分かる。

$$\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad : \text{ 対称系} \quad \Rightarrow \quad \text{ボーズ粒子} \Rightarrow \text{光子, 格子振動} \quad (1.48)$$

$$\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = -\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad : \text{ 反対称系} \quad \Rightarrow \quad \text{フェルミ粒子} \Rightarrow \text{電子} \quad (1.49)$$

ここで試しに、2つの粒子が同じ位置にあるとしてみる。つまり、式(1.48)と(1.49)において  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$  とする。まずボーズ粒子の場合は

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1)$$

と当り前の式が出てくるが、一方のフェルミ粒子の場合は

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) = -\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) \quad \text{より} \quad 2\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) = 0$$

となる。すなわち、2つのフェルミ粒子が全く同じ位置に存在することは許されない、という結論が出てくる(物に大きさがある理由)。これはパウリの排他律として知られているフェルミ粒子の重要な性質の一つであるが、パウリの排他律を正しく理解するには位置だけでなく粒子のエネルギーを考慮した議論が必要である(トンネル電流の計算などで)。そ

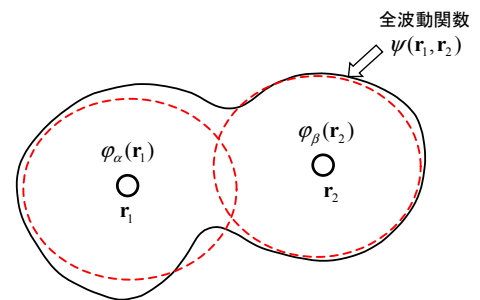


図 1.2 二粒子系の全波動関数のイメージ。粒子の位置  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$  は、お互いの影響が感じられる程度の距離だけ離れているとする。

ここで次に、図 1.3 に示すように 2 つのエネルギー準位  $E_a, E_b (\neq E_a)$  を用意して、それらに 2 つの粒子を分配することを考えていく。

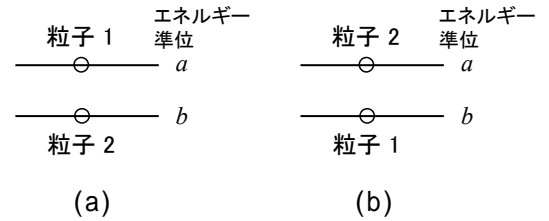


図 1.3 二粒子系でエネルギーの和が  $E_a + E_b$  となる分配の仕方.

全エネルギーが  $E_a + E_b$  となる分配の仕方は、図 1.3(a)と(b)の 2 通りある。 $\varphi_a(\mathbf{r})$ ,  $\varphi_b(\mathbf{r})$ を、それぞれエネルギー準位  $E_a, E_b$  の 1 粒子状態(図 1.4)の波動関数とすると

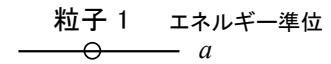
$$\text{図 1.3(a)の状態を表す波動関数} \Rightarrow \varphi_a(\mathbf{r}_1) \cdot \varphi_b(\mathbf{r}_2) \quad \text{a に粒子 1 が居て, b に粒子 2 が居る状態} \quad (1.50)$$

$$\text{図 1.3(b)の状態を表す波動関数} \Rightarrow \varphi_a(\mathbf{r}_2) \cdot \varphi_b(\mathbf{r}_1) \quad \text{a に粒子 2 が居て, b に粒子 1 が居る状態} \quad (1.51)$$

となる。では、このときの全波動関数はどのように表せば良いだろうか？ 注意しないとイケないのは、全波動関数  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  は式(1.48)と(1.49)の対称性および反対称性を満たす必要があるという点である。結論を言うと、式(1.50)と(1.51)の線形結合を取れば、上記の対称性・反対称性を満たすことが分かる。すなわち

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) \pm \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)] \quad (1.52)$$

とすれば良い(これは「量子もつれ」を表す波動関数と本質的に同じ!)。ここで、係数  $1/\sqrt{2}$  は全波動関数の規格化定数として現れる(演習問題 1)。



$$H_a \varphi_a(\mathbf{r}_1) = E_a \varphi_a(\mathbf{r}_1)$$

図 1.4 一粒子状態.

ここで、式(1.48)の対称性を満たすのは

$$\psi^B(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) + \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)] \quad \text{ボーズ粒子の全波動関数} \quad (1.53)$$

であり、一方、式(1.49)の反対称性を満たすのは

$$\psi^F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)] \quad \text{フェルミ粒子の全波動関数} \quad (1.54)$$

であることは簡単に分かるはずである。

また、 $\psi^F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  は、次のように行列式を用いて表すこともできる。

$$\psi^F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_a(\mathbf{r}_1) & \varphi_b(\mathbf{r}_1) \\ \varphi_a(\mathbf{r}_2) & \varphi_b(\mathbf{r}_2) \end{vmatrix} \quad (1.55)$$

このことから  $N$  個のフェルミ粒子の場合には、全波動関数を次のように表すことができることが分かっている。

$$\psi^F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(\mathbf{r}_1) & \varphi_2(\mathbf{r}_1) & \dots & \varphi_N(\mathbf{r}_1) \\ \varphi_1(\mathbf{r}_2) & \varphi_2(\mathbf{r}_2) & \dots & \varphi_N(\mathbf{r}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_1(\mathbf{r}_N) & \varphi_2(\mathbf{r}_N) & \dots & \varphi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix} \quad (1.56)$$

この式(1.56)をスレーターの行列式とよんでいる。

それでは、二粒子系の全波動関数(1.53)と(1.54)を使って、パウリの排他律がフェルミ粒子のみに適用されることを示す。図 1.3 で粒子 1 と粒子 2 の両方を、同じエネルギー準位  $b$  に入れるとする。この時、

$$\varphi_a(\mathbf{r}_1) \rightarrow \varphi_b(\mathbf{r}_1) \quad \text{および} \quad \varphi_a(\mathbf{r}_2) \rightarrow \varphi_b(\mathbf{r}_2) \quad (1.57)$$

となるので、これらを式(1.53)と(1.54)に代入すると

$$\psi^B(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) + \varphi_b(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)] = \frac{2}{\sqrt{2}} \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) \neq 0 \quad (1.58)$$

$$\psi^F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_b(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)] = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2)] = 0 \quad (1.59)$$

となる。式(1.59)は、2つのフェルミ粒子を同じエネルギー準位に同時に入れると全波動関数が零となり、そのような状態はあり得ないことを表している。すなわち、「一つのエネルギー準位に入れるフェルミ粒子の数は1つに限られる」というパウリの排他律を表している。

一方、式(1.58)のボーズ粒子は波動関数が零とならないことから、同じエネルギー準位に入るボーズ粒子の数は制限がないことが分かる。つまり、ボーズ粒子にはパウリの排他律は適用されない。アインシュタインは、分子間に相互作用のない理想気体を冷却すると、ある温度以下では、最もエネルギーの低い状態に多数の粒子が集まる(凝縮する)ことを理論的に導き出した。この粒子がエネルギー最低の状態に集まった状態を、**ボーズ・アインシュタイン凝縮**と呼んでいる。ボーズ・アインシュタイン凝縮の例として、液体ヘリウムの**超流動現象**が有名である。

**[問題 1.7]** 式(1.52)の規格化定数が $1/\sqrt{2}$ となることを示しなさい。ただし、1粒子波動関数 $\varphi_a(\mathbf{r})$ と $\varphi_b(\mathbf{r})$ は直交規格化条件を満たしているとする。

**解答例)**  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A[\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)]$ とおき(ただし、 $A$ は実数とする)、規格化条件

$$\iint |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = 1$$

から $A$ の値を求める。

$$\begin{aligned} \iint |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 &= A^2 \iint [\varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b^*(\mathbf{r}_2) - \varphi_a^*(\mathbf{r}_2)\varphi_b^*(\mathbf{r}_1)][\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)] d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\ &= A^2 \underbrace{\int \varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1}_{1} \underbrace{\int \varphi_b^*(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2}_{1} - A^2 \underbrace{\int \varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1}_{0} \underbrace{\int \varphi_b^*(\mathbf{r}_2)\varphi_a(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2}_{0} \\ &\quad - A^2 \underbrace{\int \varphi_a^*(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2}_{0} \underbrace{\int \varphi_b^*(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1}_{0} + A^2 \underbrace{\int \varphi_a^*(\mathbf{r}_2)\varphi_a(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2}_{1} \underbrace{\int \varphi_b^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1}_{1} \\ &= 2A^2 \\ &= 1 \end{aligned}$$

より

$$A = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}$$

が得られる。

### ■ 1粒子波動関数 $\varphi_a(\mathbf{r})$ の規格化直交条件の証明

$$\int \varphi_a^*(\mathbf{r})\varphi_b(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{ab} \quad (1.60)$$

簡単のため、図 1.5 に示す 1次元の無限大ポテンシャル井戸での 2 準位系を考える。このとき、各準位の波動関数は次のように与えられる。

$$\varphi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right), \quad \varphi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \quad (1.61)$$

式(1.60)の積分を計算すると

$$\begin{aligned}
\int_0^L \varphi_1^*(x)\varphi_2(x)dx &= \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)dx \\
&= \frac{2}{L} \frac{1}{2} \int_0^L \left[ \cos\left(\frac{\pi}{L}x\right) - \cos\left(\frac{3\pi}{L}x\right) \right] dx \\
&= \frac{1}{L} \left\{ \left[ \frac{L}{\pi} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \right]_0^L - \left[ \frac{L}{3\pi} \sin\left(\frac{3\pi}{L}x\right) \right]_0^L \right\} = 0
\end{aligned} \tag{1.62}$$

となる。一方、

$$\begin{aligned}
\int_0^L \varphi_1^*(x)\varphi_1(x)dx &= \frac{2}{L} \int_0^L \sin^2\left(\frac{\pi}{L}x\right)dx \\
&= \frac{2}{L} \frac{1}{2} \int_0^L \left[ 1 - \cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \right] dx \\
&= \frac{1}{L} \left\{ [x]_0^L - \left[ \frac{L}{2\pi} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \right]_0^L \right\} \\
&= \frac{1}{L} \times L = 1
\end{aligned} \tag{1.63}$$

となる。したがって、式(1.62)と(1.63)の結果から規格化直交条件(1.60)が成り立つことが分かる。一般的には、

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \quad \varphi_m(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right) \tag{1.64}$$

とすれば、

$$\int_0^L \varphi_n^*(x)\varphi_m(x)dx = \delta_{nm} \tag{1.65}$$

が成り立つことが証明できる。

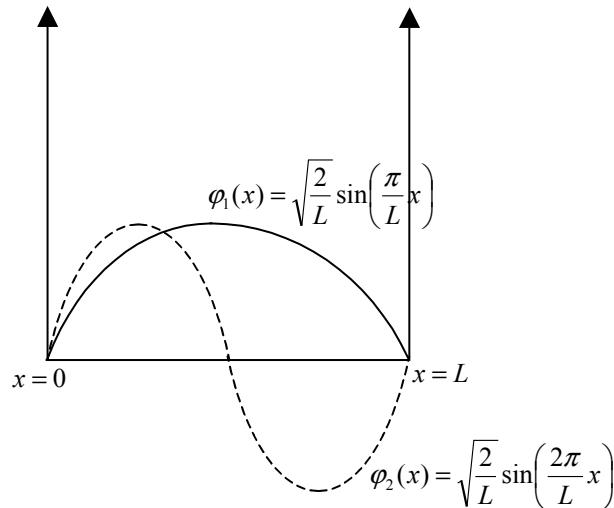


図 1.5 1次元無限大ポテンシャル井戸内の波動関数.

## 1.2 量子力学的効果

### 1.2.1 エネルギー量子化

無限大のポテンシャル障壁をもつ量子井戸内に閉じ込められた電子のエネルギーを求める(図 1.6)。簡単のため、閉じ込め方向の1次元で考える。

量子井戸内( $0 \leq x \leq L$ )の時間に依存しない1次元シュレディンガー方程式は次式で与えられる。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2} = E\varphi \quad (1.66)$$

式(1.66)の一般解は、 $A, B$ を任意定数として

$$\varphi(x) = Ae^{ik_x x} + Be^{-ik_x x} \quad (k_x > 0) \quad (1.67)$$

とすることができる。式(1.67)は物理的には、右行きの電子波と左行きの電子波の重ね合わせを意味している。量子井戸の外側(障壁内)では波動関数はゼロとなるため、境界条件は

$$\varphi(0) = \varphi(L) = 0 \quad (1.68)$$

となる。これより、

$$\varphi(0) = A + B = 0 \quad , \quad \varphi(L) = Ae^{ik_x L} + Be^{-ik_x L} = 2iA \sin k_x L = 0$$

となり、上の第2式より

$$k_x L = n\pi \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (1.69)$$

が得られる。ここで、式(1.67)の一般解では $k_x > 0$ と限定されるため、式(1.69)の $n$ は正の整数のみとなる(つまり自然数)。このときの波動関数は

$$\varphi(x) = Ae^{ik_x x} - Ae^{-ik_x x} = 2iA \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \equiv \varphi_n(x) \quad (1.70)$$

となり、量子井戸内に定在波が形成されることが分かる。これを式(1.66)のシュレディンガー方程式へ代入すると

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 2iA \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) = E \times 2iA \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

より、電子のエネルギーが次のように求められる。

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (1.71)$$

量子井戸内に閉じ込められた電子のエネルギーは正の整数値 $n$ に依存するとびとびの値を取ることであり、これをエネルギーの量子化(energy quantization)という。式(1.71)の分母に電子の質量 $m$ が含まれていることから、同じ量子井戸幅でも有効質量の軽い材料(あるいはバンド)ほど量子化エネルギーの値が大きくなる。このことは、ナノ構造デバイスの解析において大変重要な役割を演じる(5章参照)。

一方、波動関数の規格化については、式(1.70)で $2iA = C$ とおいて

$$\int_0^L |\varphi_n(x)|^2 dx = C^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = \frac{C^2}{2} \int_0^L \left[1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)\right] dx = \frac{C^2 L}{2} = 1$$

より、係数 $C$ は $C = \sqrt{2/L}$ となる。これより規格化された波動関数は次式で与えられることになる。

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (1.72)$$

ここで、バルク結晶中の電子の運動エネルギーを、式(1.1)のド・ブロイ波長で表すと

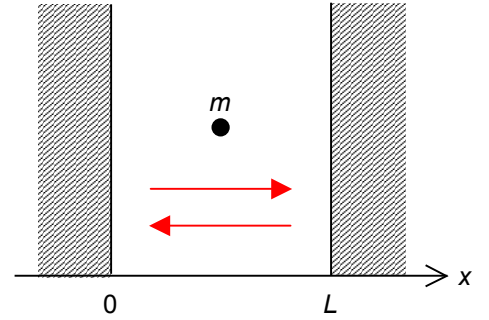


図 1.6 井戸型ポテンシャル(量子井戸)。

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left( \frac{h}{\lambda} \right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \quad (1.73)$$

となる。上式と量子化エネルギーの式(1.71)を比較すると

$$L \ll \lambda \quad (1.74)$$

となる時に、量子化の影響が強く現れてくることがわかる。式(1.74)の関係と問題 1.1 の結果より、Si よりも GaAs の方が量子化の影響が表れやすいことが理解できる。

**[問題 1.8]** 有限高さのポテンシャル障壁の場合、波動関数はポテンシャル障壁へしみ出す。この場合、量子化エネルギーの値は、式(1.71)に比べてどのように変化するか考えよ。

### 1.2.2 トンネル効果

図 1.7 のような高さ  $V_0$ 、幅  $L$  の単一ポテンシャル障壁に、エネルギー  $E$  の粒子が左方から飛んでくる場合を考える。古典論では、 $E < V_0$  の粒子はポテンシャル障壁に跳ね返されるため、領域 III に入ることはできない。一方、量子論では、たとえ  $E < V_0$  の粒子でも、ある確率で図 1.7 の障壁を通り抜けることができる。これをトンネル効果(tunneling effect)と呼び、量子力学で言うところの電子の波動性に起因する現象である。本項では、この単一ポテンシャル障壁のトンネル確率を求める。

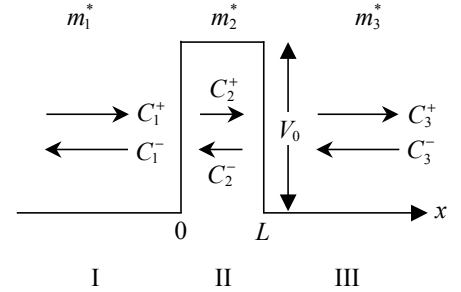


図 1.7 単一ポテンシャル障壁。

各領域 (I, II, III) のポテンシャルエネルギーを次のように表したとき、

$$V_j = \begin{cases} 0, & j=1 \quad (x < 0) \\ V_0, & j=2 \quad (0 \leq x \leq L) \\ 0, & j=3 \quad (x > L) \end{cases} \quad (1.75)$$

解くべきシュレディンガー方程式は次のようになる。

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_j \right] \varphi_j(x) = E_x \varphi_j(x) \quad (j=1, 2, 3) \quad (1.76)$$

ここでは、各領域の電子の有効質量は等しく  $m_1^* = m_2^* = m_3^* = m$  とした。次に各領域の波動関数を、以下のように右に向かって進む平面波  $C^+ e^{ikx}$  と左に向かって進む平面波  $C^- e^{-ikx}$  の重ね合わせで表す。

$$\varphi_1(x) = C_1^+ e^{ik_1 x} + C_1^- e^{-ik_1 x} \quad (1.77a)$$

$$\varphi_2(x) = C_2^+ e^{ik_2 x} + C_2^- e^{-ik_2 x} \quad (1.77b)$$

$$\varphi_3(x) = C_3^+ e^{ik_3 x} + C_3^- e^{-ik_3 x} \quad (1.77c)$$

ここで  $k_j$  は各領域の電子の波数であり次のように定義される。

$$k_j = \frac{\sqrt{2m(E_x - V_j)}}{\hbar} \quad (j=1, 2, 3) \quad (1.78)$$

式(1.78)において  $E_x$  は  $V_j$  より大きくても小さくても良いが、 $E_x$  が  $V_j$  より小さい場合には、

$$k_j = \frac{\sqrt{-2m(V_j - E_x)}}{\hbar} = i \frac{\sqrt{2m(V_j - E_x)}}{\hbar} \quad (1.79)$$

となり波数  $k_j$  は虚数になる。したがって波数  $k_j$  は一般には複素数であると考え。次に、 $x=0$  と  $L$  での波動関数の境界条件(boundary condition)を次のように与える。

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0) \quad , \quad \varphi_2(L) = \varphi_3(L) \quad (1.80)$$



$$\left. \frac{d\varphi_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\varphi_2}{dx} \right|_{x=0}, \quad \left. \frac{d\varphi_2}{dx} \right|_{x=L} = \left. \frac{d\varphi_3}{dx} \right|_{x=L} \quad (1.81)$$

これらは、異なる領域間の境界では波動関数の値とその傾きが等しいことを要請する表現になっているが、より一般的には、式(1.42)の確率流密度が境界で連続になるという条件から導き出されるものである(後述の「有効質量が各領域で異なる場合」を参照のこと)。式(1.80)と(1.81)を波動関数(1.77a-c)に適用すると、

$$C_1^+ + C_1^- = C_2^+ + C_2^- \quad (1.82a)$$

$$C_2^+ e^{ik_2L} + C_2^- e^{-ik_2L} = C_3^+ e^{ik_3L} + C_3^- e^{-ik_3L} \quad (1.82b)$$

$$k_1(C_1^+ - C_1^-) = k_2(C_2^+ - C_2^-) \quad (1.82c)$$

$$k_2(C_2^+ e^{ik_2L} - C_2^- e^{-ik_2L}) = k_3(C_3^+ e^{ik_3L} - C_3^- e^{-ik_3L}) \quad (1.82d)$$

が得られる。ここで式(1.82a)と(1.82c)から

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ k_1 & -k_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1^+ \\ C_1^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ k_2 & -k_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_2^+ \\ C_2^- \end{bmatrix} \quad (1.83)$$

また式(1.82b)と式(1.82d)から

$$\begin{bmatrix} e^{ik_2L} & e^{-ik_2L} \\ k_2 e^{ik_2L} & -k_2 e^{-ik_2L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_2^+ \\ C_2^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ik_3L} & e^{-ik_3L} \\ k_3 e^{ik_3L} & -k_3 e^{-ik_3L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_3^+ \\ C_3^- \end{bmatrix} \quad (1.84)$$

と表わされることを用いて、領域 I と III の波動関数の関係  $(C_1^+, C_1^-) \leftrightarrow (C_3^+, C_3^-)$  を導出する。まず式(1.83)より

$$\begin{bmatrix} C_1^+ \\ C_1^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ k_1 & -k_1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ k_2 & -k_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_2^+ \\ C_2^- \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + \frac{k_2}{k_1} & 1 - \frac{k_2}{k_1} \\ 1 - \frac{k_2}{k_1} & 1 + \frac{k_2}{k_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_2^+ \\ C_2^- \end{bmatrix} \quad (1.85)$$

次に式(1.84)より

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} C_2^+ \\ C_2^- \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} e^{ik_2L} & e^{-ik_2L} \\ k_2 e^{ik_2L} & -k_2 e^{-ik_2L} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} e^{ik_3L} & e^{-ik_3L} \\ k_3 e^{ik_3L} & -k_3 e^{-ik_3L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_3^+ \\ C_3^- \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{k_3}{k_2}\right) e^{-i(k_2-k_3)L} & \left(1 - \frac{k_3}{k_2}\right) e^{-i(k_2+k_3)L} \\ \left(1 - \frac{k_3}{k_2}\right) e^{i(k_2+k_3)L} & \left(1 + \frac{k_3}{k_2}\right) e^{i(k_2-k_3)L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_3^+ \\ C_3^- \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (1.86)$$

となるので、式(1.86)を(1.85)に代入すると  $(C_1^+, C_1^-)$  と  $(C_3^+, C_3^-)$  の関係式として次式が得られる。

$$\begin{bmatrix} C_1^+ \\ C_1^- \end{bmatrix} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 + \frac{k_2}{k_1} & 1 - \frac{k_2}{k_1} \\ 1 - \frac{k_2}{k_1} & 1 + \frac{k_2}{k_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{k_3}{k_2}\right) e^{-i(k_2-k_3)L} & \left(1 - \frac{k_3}{k_2}\right) e^{-i(k_2+k_3)L} \\ \left(1 - \frac{k_3}{k_2}\right) e^{i(k_2+k_3)L} & \left(1 + \frac{k_3}{k_2}\right) e^{i(k_2-k_3)L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_3^+ \\ C_3^- \end{bmatrix} \quad (1.87)$$

図 1.7 の構造のトンネル確率を求めるために、電子波は領域 I の左方から振幅 1 で入射し、振幅  $r$  で反射され、振幅  $t$  で透過するとする。このとき式(1.87)は

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} &= \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 + \frac{k_2}{k_1} & 1 - \frac{k_2}{k_1} \\ 1 - \frac{k_2}{k_1} & 1 + \frac{k_2}{k_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{k_3}{k_2}\right) e^{-i(k_2-k_3)L} & \left(1 - \frac{k_3}{k_2}\right) e^{-i(k_2+k_3)L} \\ \left(1 - \frac{k_3}{k_2}\right) e^{i(k_2+k_3)L} & \left(1 + \frac{k_3}{k_2}\right) e^{i(k_2-k_3)L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{4} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) e^{-i(k_2-k_1)L} + \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) e^{i(k_2+k_1)L} \\ \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) e^{-i(k_2-k_1)L} + \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) e^{i(k_2+k_1)L} \end{bmatrix} t \end{aligned} \quad (1.88)$$

となる。ここで、トンネル障壁に電圧がかかっていないとして  $k_1 = k_3$  とした。上式の第 1 行目の式より振幅透過率  $t$  を求め、そこから電子の確率密度  $|\varphi|^2$  に対するトンネル確率  $T(E_x)$  を求めると次式が得られる。

$$T(E_x) = \left[ 1 + \frac{V_0^2}{4E_x(E_x - V_0)} \sin^2 \sqrt{2m(E_x - V_0)}L/\hbar \right]^{-1}, \quad E_x > V_0 \quad (1.89)$$

次に、 $E_x < V_0$  の電子に対しては、 $\sin i\theta = i \sinh \theta$  の関係を用いると

$$\sin^2 \sqrt{2m(E_x - V_0)}L/\hbar = \sin^2 i \underbrace{\sqrt{2m(V_0 - E_x)}L/\hbar}_{\alpha} = (\sin i\alpha)^2 = (i \sinh \alpha)^2 = -\sinh^2 \alpha \quad (1.90)$$

と表すことができるので、結局、 $E_x < V_0$  の電子に対するトンネル確率は、

$$T(E_x) = \left[ 1 + \frac{V_0^2}{4E_x(V_0 - E_x)} \sinh^2 \sqrt{2m(V_0 - E_x)}L/\hbar \right]^{-1}, \quad E_x < V_0 \quad (1.91)$$

と求められる。

### 有効質量が各領域で異なる場合(半導体へテロ接合の場合)

ここでは、領域 I と III の有効質量は等しく  $m_1^* = m_3^* \neq m_2^*$  の場合を考える。このときの境界条件は

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0) \quad , \quad \varphi_2(L) = \varphi_3(L) \quad (1.92)$$

$$\frac{1}{m_1^*} \frac{d\varphi_1}{dx} \Big|_{x=0} = \frac{1}{m_2^*} \frac{d\varphi_2}{dx} \Big|_{x=0} \quad , \quad \frac{1}{m_2^*} \frac{d\varphi_2}{dx} \Big|_{x=L} = \frac{1}{m_1^*} \frac{d\varphi_3}{dx} \Big|_{x=L} \quad (1.93)$$

と与えられる。式(1.93)において波動関数の傾きの前に有効質量の逆数がかかるのは、式(1.42)の確率流密度が境界で連続になるという条件から課されたものである。これらの境界条件を用いて、上に述べた方法により単一トンネル障壁のトンネル確率を計算すると、 $\gamma = m_2^*/m_1^*$  として

$$T(E_x) = \left[ 1 + \frac{[(1-\gamma)E_x - V_0]^2}{4\gamma E_x(E_x - V_0)} \sin^2 \sqrt{2m_2^*(E_x - V_0)}L/\hbar \right]^{-1} \quad (E_x > V_0) \quad (1.94)$$

と求められる。半導体のヘテロ構造などでは有効質量が領域によって異なることが多く、トンネル確率の計算の際には注意が必要である。

[問題 1.9] 式(1.88)からトンネル確率の式(1.89)を導出せよ。

[問題 1.10] 有効質量が各領域で異なる場合のトンネル確率の式(1.94)を導出せよ。

[問題 1.11] GaAs ( $m_1^* = 0.067m_0$ ) / AlAs ( $m_2^* = 0.15m_0$ ) 単一トンネル障壁を例にとり、材料の有効質量の違いがトンネル確率に与える影響を検討せよ。障壁の高さは適宜与えて計算せよ。

### 1.2.3 トランスファー・マトリックス(転送行列)法

単一ポテンシャル障壁のように単純な構造の場合には、前項で述べたようにトンネル確率を解析的に求めることができる。しかし、二重ポテンシャル障壁や電圧を印加した場合などでは、そのような解析解を導き出すことは難しい。そこで、コンピュータによる数値計算を用いて様々なポテンシャル障壁構造や電圧条件の下でもトンネル確率が計算できるように考え出された方法がトランスファー・マトリックス(転送行列)法 [1]である。本項ではこのトランスファー・マトリックス法について解説する。

転送行列法の考え方は以下の通りである。まず異なる領域間の境界、たとえば図 1.7 の場合は、 $x=0$  と  $L$  の 2 箇所で、各領域の波動関数の係数の関係を求めて、それらを一番左の領域から一番右の領域まで順に転送するという

ものである。図 1.7 の構造に対して具体的に書くと次のようになる。

$x=0$  では式(1.83)(あるいは式(1.85))より

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} C_2^+ \\ C_2^- \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ k_2 & -k_2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ k_1 & -k_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1^+ \\ C_1^- \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + \frac{k_1}{k_2} & 1 - \frac{k_1}{k_2} \\ 1 - \frac{k_1}{k_2} & 1 + \frac{k_1}{k_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1^+ \\ C_1^- \end{bmatrix} = M^{II,I} \begin{bmatrix} C_1^+ \\ C_1^- \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (1.95)$$

ここで、

$$M^{II,I} \equiv \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + \frac{k_1}{k_2} & 1 - \frac{k_1}{k_2} \\ 1 - \frac{k_1}{k_2} & 1 + \frac{k_1}{k_2} \end{bmatrix} \quad (1.96)$$

は、領域 I の係数を領域 II に転送する転送行列である。一方、 $x=L$  では式(1.84)(あるいは式(1.86))より

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} C_3^+ \\ C_3^- \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} e^{ik_3L} & e^{-ik_3L} \\ k_3 e^{ik_3L} & -k_3 e^{-ik_3L} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} e^{ik_2L} & e^{-ik_2L} \\ k_2 e^{ik_2L} & -k_2 e^{-ik_2L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_2^+ \\ C_2^- \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{k_2}{k_3}\right) e^{i(k_2-k_3)L} & \left(1 - \frac{k_2}{k_3}\right) e^{-i(k_2+k_3)L} \\ \left(1 - \frac{k_2}{k_3}\right) e^{i(k_2+k_3)L} & \left(1 + \frac{k_2}{k_3}\right) e^{-i(k_2-k_3)L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_2^+ \\ C_2^- \end{bmatrix} = M^{III,II} \begin{bmatrix} C_2^+ \\ C_2^- \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (1.97)$$

ここで、

$$M^{III,II} \equiv \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{k_2}{k_3}\right) e^{i(k_2-k_3)L} & \left(1 - \frac{k_2}{k_3}\right) e^{-i(k_2+k_3)L} \\ \left(1 - \frac{k_2}{k_3}\right) e^{i(k_2+k_3)L} & \left(1 + \frac{k_2}{k_3}\right) e^{-i(k_2-k_3)L} \end{bmatrix} \quad (1.98)$$

は、領域 II の係数を領域 III に転送する転送行列である。式(1.96)と(1.98)から、転送行列の一般式が次式で与えられることが分かる。

$$M^{i+1,i} \equiv \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{k_i}{k_{i+1}}\right) e^{i(k_i-k_{i+1})x_{i,i+1}} & \left(1 - \frac{k_i}{k_{i+1}}\right) e^{-i(k_i+k_{i+1})x_{i,i+1}} \\ \left(1 - \frac{k_i}{k_{i+1}}\right) e^{i(k_i+k_{i+1})x_{i,i+1}} & \left(1 + \frac{k_i}{k_{i+1}}\right) e^{-i(k_i-k_{i+1})x_{i,i+1}} \end{bmatrix} \quad (1.99)$$

ここで、 $x_{i,i+1}$  は各境界の位置を表す。したがって、

$$\begin{bmatrix} C_3^+ \\ C_3^- \end{bmatrix} = M^{III,II} \begin{bmatrix} C_2^+ \\ C_2^- \end{bmatrix} = M^{III,II} \times M^{II,I} \begin{bmatrix} C_1^+ \\ C_1^- \end{bmatrix} = M^T \begin{bmatrix} C_1^+ \\ C_1^- \end{bmatrix} \quad (1.100)$$

となって、領域 I の係数が領域 III へ、次の行列  $M^T$  で転送されることが分かる。

$$\begin{aligned}
M^T &= M^{III,II} \times M^{II,I} \\
&= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{k_2}{k_3}\right) e^{i(k_2-k_3)L} & \left(1 - \frac{k_2}{k_3}\right) e^{-i(k_2+k_3)L} \\ \left(1 - \frac{k_2}{k_3}\right) e^{i(k_2+k_3)L} & \left(1 + \frac{k_2}{k_3}\right) e^{-i(k_2-k_3)L} \end{bmatrix} \times \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + \frac{k_1}{k_2} & 1 - \frac{k_1}{k_2} \\ 1 - \frac{k_1}{k_2} & 1 + \frac{k_1}{k_2} \end{bmatrix} \\
&\equiv \begin{bmatrix} M_{11}^T & M_{12}^T \\ M_{21}^T & M_{22}^T \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{1.101}$$

ここで、各領域の電子の波数(複素数)は式(1.78)で与えられている。式(1.101)の最後の式では、行列  $M^T$  の各行列要素をそのまま  $M_{11}^T, M_{12}^T, M_{21}^T, M_{22}^T$  と表している。今考えている単一ポテンシャル障壁では、これらの各行列要素を前項のように簡単に求めることができるが、トランスファー・マトリックス法の特徴は、解析的には解くことが難しい複雑なトンネル障壁の問題をコンピュータに解かせる所にある。そのため、式(1.101)の各行列要素の計算はプログラミングによりコンピュータに実行させることとし、ここでは  $M_{11}^T, M_{12}^T, M_{21}^T, M_{22}^T$  とだけ表すことにする。

トンネル確率を求めるために、前項と同様に、電子波は領域 I の左方から振幅 1 で入射し、振幅  $r$  で反射され、振幅  $t$  で透過するとすると、式(1.100)は次のように書き直される。

$$\begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} = M^T \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11}^T & M_{12}^T \\ M_{21}^T & M_{22}^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} \tag{1.102}$$

これより、

$$\begin{aligned}
t &= M_{11}^T + M_{12}^T r \\
0 &= M_{21}^T + M_{22}^T r
\end{aligned} \tag{1.103}$$

となるので、これを  $r$  と  $t$  について解くと

$$r = -\frac{M_{21}^T}{M_{22}^T} \tag{1.104}$$

と

$$t = M_{11}^T - \frac{M_{12}^T M_{21}^T}{M_{22}^T} = \frac{M_{11}^T M_{22}^T - M_{12}^T M_{21}^T}{M_{22}^T} = \frac{|M^T|}{M_{22}^T} \tag{1.105}$$

が得られる。行列式の性質より、 $|M^T| = |M^{III,II}| \cdot |M^{II,I}|$  が使えるので

$$\begin{aligned}
|M^T| &= \frac{1}{4} \left[ \left(1 + \frac{k_2}{k_3}\right)^2 - \left(1 - \frac{k_2}{k_3}\right)^2 \right] \times \frac{1}{4} \left[ \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right)^2 - \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right)^2 \right] \\
&= \frac{1}{4} \frac{4k_2}{k_3} \cdot \frac{1}{4} \frac{4k_1}{k_2} \\
&= \frac{k_1}{k_3}
\end{aligned} \tag{1.106}$$

と簡単になる。これを式(1.105)に用いると、電子の確率密度に対するトンネル確率  $T(E_x)$  を計算する式が次のように与えられる。

$$T(E_x) = |t|^2 = \left| \frac{k_1}{k_3} \frac{1}{M_{22}^T} \right|^2 \tag{1.107}$$

すなわち転送行列法による透過確率の計算には、行列要素  $M_{22}^T$  と左端領域の電子波数  $k_1$  と右端領域の電子波数  $k_3$  が分かれば良い。一般に電圧が印加された場合には  $k_1 \neq k_3$  となる。障壁が多数存在する場合には、各境界で転送行列を定義して式(1.101)のように掛け合わせるだけで良い。また、なめらかに変化するポテンシャル分布の場合には、ポテンシャル形状を細かい階段の連続で近似して(階段近似)、同様に各転送行列を掛け合わせることで精度良くトンネル確率を計算することができる。

## 参考文献

- [1] Y. Ando and A. Itoh, "Calculation of transmission tunneling current across arbitrary potential barriers," *J. Appl. Phys.*, vol. 61, pp. 1497-1502 (1987).

## 2章 バンド理論

### 2.1 周期格子中の電子とブロッホの定理

金属や半導体などの高い導電率を持つ導体は、電気を伝える伝導電子が多数存在する。多数の電子が存在する固体内の電子状態は多電子問題となっていて、これを厳密に解くことはほとんど不可能である(第3章「第一原理計算法」を参照のこと)。そこで1個の電子の振舞いだけに着目し、他の電子からの影響は原子核からの影響と合わせて結晶内の電子のポテンシャルエネルギーになるという**1電子近似(one-electron approximation)**の方法が用いられる。本章では、このような1電子近似のもとでのバンド理論を学んでいく。

金属の場合を例にとると、伝導電子は固体を構成している各原子から離れて結晶全体に分布しているため、電子の抜けた原子は正に帯電したイオンとなっている。したがって伝導電子は、各格子原子の作るポテンシャルの影響を受けながら運動することになる。このイオンが1価に帯電している場合、1つのイオンが作るポテンシャルエネルギーは

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}|} \quad (2.1)$$

で与えられる。結晶中のポテンシャルは、図2.1に示すように各原子のポテンシャルを足し合わせたものになる。固体のように隣の原子が接近してくると、孤立状態では特定の原子核だけの影響(図2.1の破線)を受けていた電子が、隣の原子核からも引っ張られるようになり、隣り合う原子間のポテンシャル障壁は非常に小さくなる(図2.1の実線)。言い換えると、固体が形成された場合、真空のポテンシャルエネルギーは大きいので、固体内の電子が自由に真空中に飛び出すことはできないが、隣の原子との間のポテンシャル障壁が小さくなるので、電子は隣の原子にも自由に行けるようになる。このようにして形成されたバンドが**伝導帯(conduction band)**であり、これに対して各原子が周期配列し安定した結晶構造を実現するためのバンド(結合枝)を形成するバンドが**価電子帯(valence band)**である。図2.1のNa結晶の場合では、1s、2s、2p軌道が価電子帯を構成する(半導体では、伝導帯と価電子帯が接近するところでは2p軌道と3s軌道が混ざり合ったsp<sup>3</sup>混成軌道を形成することが多い)。

#### 参考)擬ポテンシャル法

図2.1から分かるように、1s軌道の電子は原子核の強いクーロン引力のために原子核周辺に束縛されている。このような内殻電子は原子核周辺で大きな運動エネルギーをもって運動するため、電子の波動関数は原子核周辺で激しく振動する。したがって、そのまま平面波基底を用いると非常に大きなカットオフエネルギーが必要となり計算時間が非現実的なオーダーにまで増大してしまう。そこで、内殻の電子状態を計算せずに固体の電子状態として重要な価電子の状態だけを計算できるように考え出されたのが、**擬ポテンシャル(pseudopotential)**である。擬ポテンシャルを用いれば、原子核周辺の激しい振動は平滑化されカットオフエネルギーをそれほど大きくとらなくても価電子の波動関数を良い近似で記述することができる。後述の2.3 **経験的擬ポテンシャル**も半導体の重要な価電子状態である「重い正孔」と「軽い正孔」のバンド構造を、少ない平面波数で計算することを可能にしている。

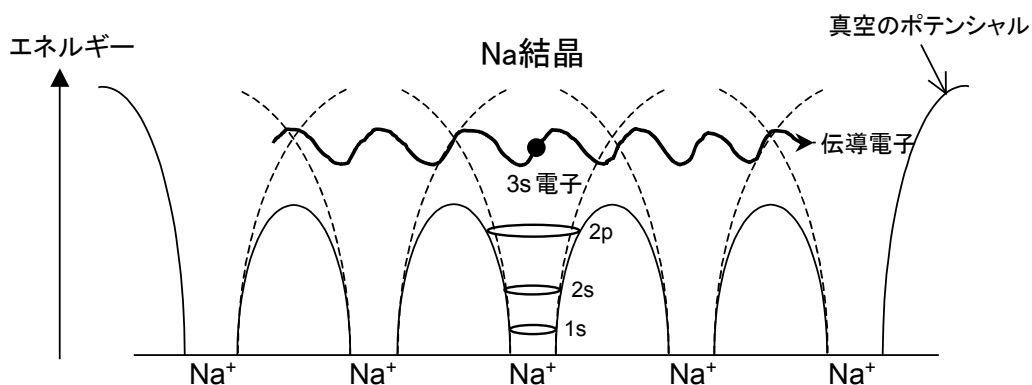


図 2.1 格子点を結ぶ直線に沿って描いたポテンシャル分布(Na 金属の場合)。

本章では、固体のバンド構造を計算するためのバンド理論を講述する。バンド構造を計算することは、つまり

「時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi+V(\mathbf{r})\varphi=E\varphi \quad (2.2)$$

を、周期ポテンシャル  $V(\mathbf{r})$  のもとでブロッホの定理を用いて解く」

ということである。そこでブロッホの定理を復習しておく。

## ブロッホの定理

結晶内で形成される周期ポテンシャル  $V(\mathbf{r})=V(\mathbf{r}+\mathbf{R})$  のもとでは、次の**ブロッホの定理**(Bloch theorem)が成立する。すなわち、周期ポテンシャル中の電子の波動関数(シュレディンガー方程式の解)は、

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})=e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.3)$$

で与えられる。ここで、 $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  は波数  $\mathbf{k}$  に依存し結晶と同じ周期  $\mathbf{R}$  をもつ周期関数であり次式を満たす。

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})=u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) \quad (2.4)$$

$\mathbf{R}$  は格子ベクトルとよばれ、結晶の周期構造を表す重要な物理量である。式(2.3)で与えられる波動関数はブロッホ関数とよばれ、物理的には、結晶内の電子の波動関数は、自由電子モデルの平面波が結晶ポテンシャル  $V(\mathbf{r})$  で変調されることを示している。その結果、電子の波動関数は、位置が  $\mathbf{R}$  変化すると位相が  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$  変化することが分かる[問題 2.2]。

[問題 2.1] ブロッホの定理を証明せよ。

[問題 2.2]  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R})=e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  が成り立つことを証明せよ。

## 2.2 クローニツヒ・ペニーモデル

実際のバンド構造を計算するにはコンピュータを用いた数値計算が必要になる。しかしながら数値計算をベースにしたアプローチでは、正確なバンド構造が得られる反面、固体のバンド理論で重要となる概念(許容帯、禁制帯(バンドギャップ)、第一ブリルアンゾーン、ブラッグ反射、ブロッホ振動等)を理解することは難しい。そこで本節では、解析的にバンド構造を求めることができる**クローニツヒ・ペニーモデル**を用いて、固体のバンド構造に関する概念を理解しておく。なお、クローニツヒ・ペニーモデルにおいても、「時間に依存しないシュレディンガー方程式をブロッホの定理を用いて解く」ことは同じである。

結晶の周期ポテンシャルを単純化して図 2.2 に示すように、周期  $L$  で矩形型ポテンシャルが並んでいるというモデルで考える。このときのシュレディンガー方程式と波動関数は、井戸層と障壁層でそれぞれ次のように与えられる。

$$0 \leq x \leq a : -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2} = E\varphi_1(x) \quad , \quad \varphi_1(x) = C_1^+ e^{i\alpha x} + C_1^- e^{-i\alpha x} \quad (2.5)$$

$$-b \leq x \leq 0 : \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right] \varphi_2(x) = E\varphi_2(x) \quad , \quad \varphi_2(x) = C_2^+ e^{\beta x} + C_2^- e^{-\beta x} \quad (2.6)$$

ただし

$$\alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0 \quad (2.7)$$

$$\beta = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (E < V_0 \text{ とする}) \quad (2.8)$$

である。井戸内の波動関数は、式(2.5)のように右に向かって進む平面波  $C_2^+ e^{i\alpha x}$  と左に向かって進む平面波  $C_2^- e^{-i\alpha x}$  の足し合わせで表されている。一方、障壁層内の波動関数は、ここでは  $E < V_0$  の電子を考えると、式(2.6)に示すように右に向かって減衰する波と左に向かって減衰する波の足し合わせで表している。これらの波動関数に対して、 $x = -b$  と  $0$  で境界条件を与え、さらに前節で述べたブロッホの定理を用いることで、電子の分散関係を与える式が次のように求められる。

$x = -b$  と  $0$  での境界条件は、1.2.2 トンネル効果で用いた表現と同様に

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0) \quad , \quad \left. \frac{d\varphi_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\varphi_2}{dx} \right|_{x=0} \quad (2.9)$$

$$\varphi_1(-b) = \varphi_2(-b) \quad , \quad \left. \frac{d\varphi_1}{dx} \right|_{x=-b} = \left. \frac{d\varphi_2}{dx} \right|_{x=-b} \quad (2.10)$$

で与える。ここでは原子に対するシュレディンガー方程式を解くので、電子の質量  $m$  は自由電子質量 ( $m = m_0$ ) である。

まず式(2.9)の境界条件より

$$C_1^+ + C_1^- = C_2^+ + C_2^- \quad (2.11)$$

$$i\alpha(C_1^+ - C_1^-) = \beta(C_2^+ - C_2^-) \quad (2.12)$$

が得られる。次に、ブロッホの定理から導かれる次式の関係(問題 2.2 より)

$$\varphi_k(x+L) = e^{ik(x+L)} u_k(x+L) = e^{ikL} \cdot e^{ikx} u_k(x) = e^{ikL} \varphi_k(x) \quad (2.13)$$

に、一方の境界条件(2.10)を適用すると

$$\varphi_1(a) = e^{ikL} \varphi_1(-b) = e^{ikL} \varphi_2(-b) \quad (2.14)$$

と

$$\left. \frac{d\varphi_1}{dx} \right|_{x=a} = e^{ikL} \left. \frac{d\varphi_1}{dx} \right|_{x=-b} = e^{ikL} \left. \frac{d\varphi_2}{dx} \right|_{x=-b} \quad (2.15)$$

が得られるので、これらに式(2.5)と(2.6)を代入すると

$$C_1^+ e^{i\alpha a} + C_1^- e^{-i\alpha a} = e^{ikL} (C_2^+ e^{-\beta b} + C_2^- e^{\beta b}) \quad (2.16)$$

$$i\alpha(C_1^+ e^{i\alpha a} - C_1^- e^{-i\alpha a}) = e^{ikL} \beta(C_2^+ e^{-\beta b} - C_2^- e^{\beta b}) \quad (2.17)$$

となる。式(2.11)、(2.12)、(2.16)、(2.17)を行列にまとめると

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ i\alpha & -i\alpha & -\beta & \beta \\ e^{i\alpha a} & e^{-i\alpha a} & -\lambda e^{-\beta b} & -\lambda e^{\beta b} \\ i\alpha e^{i\alpha a} & -i\alpha e^{-i\alpha a} & -\lambda \beta e^{-\beta b} & \lambda \beta e^{\beta b} \end{bmatrix}}_M \begin{bmatrix} C_1^+ \\ C_1^- \\ C_2^+ \\ C_2^- \end{bmatrix} = 0 \quad (2.18)$$

となる。ここで

$$\lambda = e^{ikL} \quad (2.19)$$

とおいた。波動関数がゼロとならないためには、式(2.18)の行列式がゼロであれば良いので

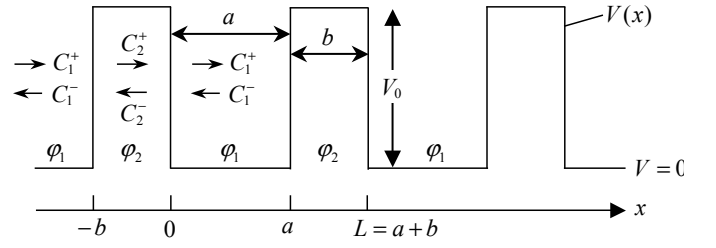


図 2.2 クローニツヒ・ペニーモデル(ポテンシャル分布).  $0 \leq x \leq a$  と  $-(a+b) \leq x \leq -b$  の領域は周期性から同じ波動関数になる. 他の領域も同様.



$$\begin{aligned}
\det M &= \begin{vmatrix} -i\alpha & -\beta & \beta \\ e^{-i\alpha a} & -\lambda e^{-\beta b} & -\lambda e^{\beta b} \\ -i\alpha e^{-i\alpha a} & -\lambda \beta e^{-\beta b} & \lambda \beta e^{\beta b} \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} i\alpha & -\beta & \beta \\ e^{i\alpha a} & -\lambda e^{-\beta b} & -\lambda e^{\beta b} \\ i\alpha e^{i\alpha a} & -\lambda \beta e^{-\beta b} & \lambda \beta e^{\beta b} \end{vmatrix} \\
&\quad - \begin{vmatrix} i\alpha & -i\alpha & \beta \\ e^{i\alpha a} & e^{-i\alpha a} & -\lambda e^{\beta b} \\ i\alpha e^{i\alpha a} & -i\alpha e^{-i\alpha a} & \lambda \beta e^{\beta b} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} i\alpha & -i\alpha & -\beta \\ e^{i\alpha a} & e^{-i\alpha a} & -\lambda e^{-\beta b} \\ i\alpha e^{i\alpha a} & -i\alpha e^{-i\alpha a} & -\lambda \beta e^{-\beta b} \end{vmatrix} \\
&= i\alpha\lambda^2\beta - i\alpha\lambda\beta e^{-i\alpha a} e^{\beta b} - \beta^2\lambda e^{-i\alpha a} e^{-\beta b} - i\alpha\lambda\beta e^{-i\alpha a} e^{-\beta b} + i\alpha\lambda^2\beta + \beta^2\lambda e^{-i\alpha a} e^{\beta b} \\
&\quad - \left[ -i\alpha\lambda^2\beta + i\alpha\lambda\beta e^{i\alpha a} e^{\beta b} - \beta^2\lambda e^{i\alpha a} e^{-\beta b} + i\alpha\lambda\beta e^{i\alpha a} e^{-\beta b} + \beta^2\lambda e^{i\alpha a} e^{\beta b} - i\alpha\lambda^2\beta \right] \\
&\quad - \left[ i\alpha\lambda\beta e^{-i\alpha a} e^{\beta b} - \alpha^2\lambda e^{i\alpha a} e^{\beta b} - i\beta\alpha - i\alpha\beta + i\alpha\lambda\beta e^{i\alpha a} e^{\beta b} + \alpha^2\lambda e^{-i\alpha a} e^{\beta b} \right] \\
&\quad - \left[ i\alpha\lambda\beta e^{-i\alpha a} e^{-\beta b} - \alpha^2\lambda e^{i\alpha a} e^{-\beta b} + i\alpha\beta + i\alpha\beta + \alpha^2\lambda e^{-i\alpha a} e^{-\beta b} - i\alpha\lambda\beta e^{i\alpha a} e^{-\beta b} \right] \\
&= 4i\alpha\beta(\lambda^2 + 1) - 8i\alpha\beta\lambda \cos \alpha a \cosh \beta b + 4i(\alpha^2 - \beta^2)\lambda \sin \alpha a \sinh \beta b \\
&= 0
\end{aligned} \tag{2.20}$$

となる。上式を

$$\lambda + \frac{1}{\lambda} = e^{ikL} + e^{-ikL} = 2 \cos kL$$

の関係をを用いて整理すると

$$\cos \alpha a \cosh \beta b + \frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \sin \alpha a \sinh \beta b = \cos kL \tag{2.21}$$

となる。これが矩形型周期ポテンシャルのバンド構造を与える方程式である。ただしこの式は解析的に解くことはできないので、コンピュータを用いた数値計算によりエネルギー  $E$  と波数  $k$  の関係を求めることになる。式(2.21)に含まれる各変数の定義をもう一度まとめておく。

$$\alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \beta = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (E < V_0) \tag{2.22}$$

$L$ : 矩形型ポテンシャルの周期 ( $= a + b$ )

$a$ : 井戸層の厚さ、  $b$ : 障壁層の厚さ

### 簡単化したクローニツヒ・ペニーモデル

式(2.21)を簡単化して、定性的にバンド構造を求める方法を述べる。ポテンシャル障壁の面積  $V_0 b$  を一定にしたまま、幅  $b \rightarrow 0$ 、高さ  $V_0 \rightarrow \infty$  ( $\beta \rightarrow \infty$ ) の極限を考える。このとき、式(2.21)の左辺に含まれる各項は、次のように近似できる。

$$\beta b \approx 0, \quad \cosh \beta b \approx 1, \quad \sinh \beta b \approx \beta b, \quad L \approx a$$

$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \approx \frac{\beta}{2\alpha}$$

これらを用いると、式(2.21)は次のように表すことができる。

$$\cos \alpha a + \frac{\beta^2 b}{2\alpha} \sin \alpha a = \cos ka \tag{2.23}$$

ここで障壁の影響の大きさを表すパラメータ  $P$  を導入し次式で定義する。

$$P = \frac{a}{2} \beta^2 b = \frac{a}{2} \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} b \approx \frac{a}{2} \frac{2mV_0}{\hbar^2} b = \frac{mV_0 ab}{\hbar^2} \tag{2.24}$$

この  $P$  を用いると  $\frac{P}{\alpha a} = \frac{\beta^2 b}{2\alpha}$  となるので、式(2.23)を書き直すと

$$\cos \alpha a + P \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} = \cos ka \quad (2.25)$$

となる。式(2.25)に具体的に数値( $P, m, a$ )を代入して、 $E - k$ の関係(バンド構造)を求めると図 2.3 となる。この図には、自由電子の  $E - k$  関係も示している。自由電子ではどのエネルギー状態も取ることができるのに対して、周期ポテンシャル内の電子はエネルギーの実数解が存在する領域(許容帯)と存在しない領域(禁制帯)が現れることがわかる。禁制帯に対応するエネルギー範囲では、電子波が固体内を伝搬できないことになる。

ここで図 2.3 では、波数  $k$  に対して周期的に同じ分散曲線が何度も現れている。これは式(2.25)から分かるように、右辺で  $k \rightarrow k \pm 2n\pi/a$  と変化させたとしても、三角関数の性質  $\cos[(k \pm 2n\pi/a)a] = \cos ka$  より、 $E - k$  関係は波数空間において  $2\pi/a$  を周期とする周期関数( $E(k \pm 2\pi/a) = E(k)$ )となることによる。したがって、 $k > \pi/a$  と  $k < -\pi/a$  の  $E - k$  関係はすべて  $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$  の範囲に還元して表示することが可能となり、図 2.4 のように簡略化して描くことができる。この  $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$  の領域を**第一ブリルアンゾーン**(first Brillouin zone)とよぶ。問題 2.3 が示すように、第一ブリルアンゾーンの端でバンドギャップが現れる理由は、1次元格子により電子波が**ブラッグ反射**され固体内を伝搬できないことによる。ブラッグ反射を受けると電子は速度を周期的に反転させられ、実空間のある限られた範囲を往復運動し続ける。この現象を**ブロッホ振動** (Bloch oscillation) という(付録 A)。残念ながら実際の結晶では、電子がブリルアンゾーンの端に到達する前に、欠陥や散乱によって再び  $k = 0$  の点に戻ってしまうためブロッホ振動は観測されない。格子という周期性があるにもかかわらずブロッホ振動が起こらないのは、バンド幅が大きすぎて散乱効果が強いためである。そこで、**超格子**のように周期を大きくしてバンド幅を狭くすることができれば、ブロッホ振動が観測できるようになると考えたのが、IBM の **Esaki** と **Tsu** である[1]。二人はブロッホ振動が起こると超格子の速度-電界特性に負性抵抗が現れると予言し、実際に 1970 年の初期的な実験により、電流-電圧特性に負性抵抗を観測している。**半導体超格子**の概念は、このブロッホ振動の予言が始まりである。

**[問題 2.3]** 図 2.4 の第一ブリルアンゾーンの端( $k = \pm \pi/a$ )で、ブラッグ反射の条件が成立していることを確認せよ。

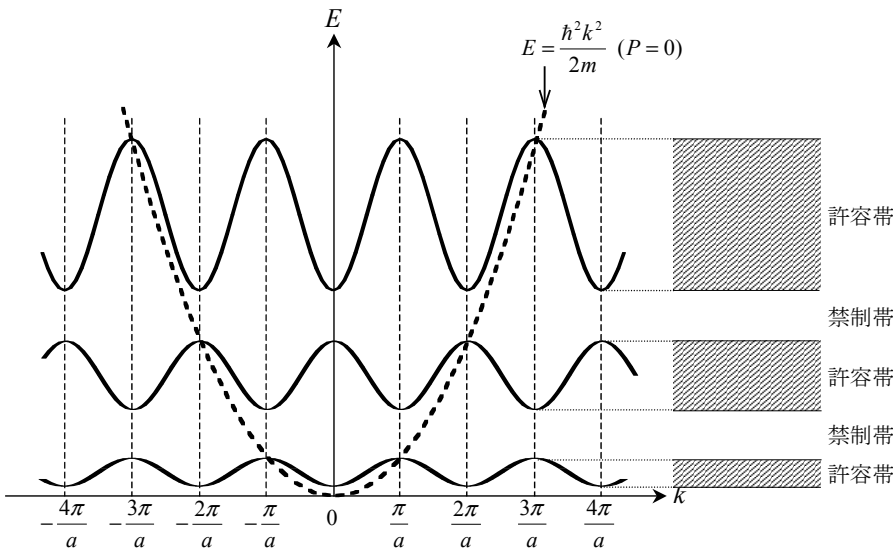


図 2.3 クローニヒ・ペニーモデルで得られる  $E - k$  関係とバンドの形成.

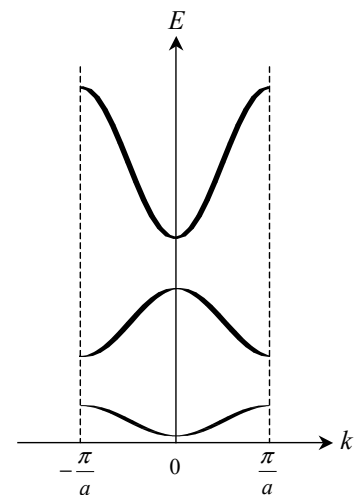


図 2.4 第一ブリルアンゾーンへの還元.

次に、以下の二つの極限を考えて、バンド構造における周期ポテンシャルの影響について定性的に理解しておく。

(1)  $P \rightarrow 0$  の極限

このとき式(2.25)は  $\cos \alpha a = \cos ka$  となるので

$$\alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = k$$

より

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{2.26}$$

が得られる。これは自由電子の分散関係である。

(2)  $P \rightarrow \infty$  の極限

一方、この極限では式(2.25)の両辺を  $P$  で割ると

$$\frac{\cos \alpha a}{P} + \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} = \frac{\cos ka}{P}$$

となり  $P \rightarrow \infty$  とすると  $\sin \alpha a = 0$  となる。すなわち  $\alpha a = n\pi$  ( $n$ : 自然数) の条件が得られるので、これより電子のエネルギーは

$$\alpha a = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a = n\pi \quad E = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n\pi}{a} \right)^2 \tag{2.27}$$

と求められる。これは無限大の量子井戸に閉じ込められた電子の量子化エネルギーである。

図 2.5 にこれら二つの極限のバンド構造を、それぞれ破線と黒丸で示す。  $P \rightarrow \infty$  の極限では電子は井戸内に完全に束縛されているためエネルギーは離散的になるが、それを敢えてバンド構造中に描くと、  $E_1$ 、  $E_2$  で示すような水平な直線になる。このようなバンドを「分散のないバンド」(dispersion-less band)とよび、原子核や不純物などに強く束縛された局在電子(つまり結晶中を伝搬しない電子波)の分散曲線として、実際のバンド構造でも出現することがある。分散のないバンドが現れた場合は、不純物や欠陥あるいは表面準位などに捉われた電子を疑うと良い。

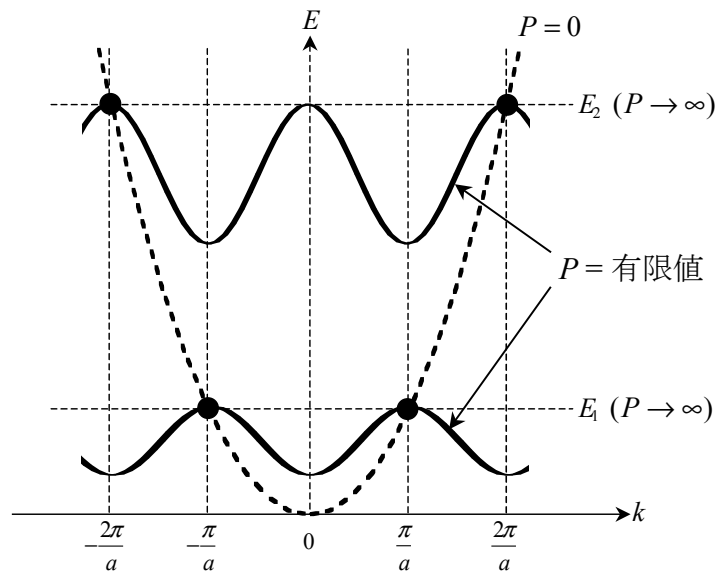


図 2.5 ポテンシャル障壁の大きさ  $P$  による  $E-k$  関係の変化の様子。

### 2.3 経験的擬ポテンシャル法

前節で述べたクローニッヒ・ペニーモデルでは、バンド構造を理解する上で重要な概念(許容帯、バンドギャップ、第一ブリルアンゾーン、ブラッグ反射等)を学ぶことができた。ただしこの方法では、実際の物質のバンド構造を計算するのに必要な情報、たとえば結晶構造や構成原子の種類などを取り扱うことはできない。また、実際の物質は 3 次

元構造を持っているため第一ブリルアンゾーンも通常 3 次元となるが、そのときに結晶の対称性から出てくる  $\Gamma$ 、L、X 点などのブリルアンゾーンの特異点についても学ぶことはできない。本節では、そのような実際のバンド構造を計算することのできる手法の一つである経験的擬ポテンシャル法(empirical pseudopotential method)について講述する。

経験的擬ポテンシャル法では、式(2.2)のシュレディンガー方程式にブロッホの定理を適用した次式を用いてバンド構造を計算する。

$$\left[ \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}|^2}{2m} - \frac{i\hbar^2}{m} \mathbf{k} \cdot \nabla - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.28)$$

ここで  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  (ブロッホの周期関数) は、波数  $\mathbf{k}$  に依存し結晶と同じ周期  $\mathbf{R}$  をもつ周期関数であり式(2.4)を満たす。したがって  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  は、平面波基底を用いて次式のようにフーリエ展開することができる。

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}'} A_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \quad (2.29)$$

ここで  $A_{\mathbf{k}'}$  は展開係数である。式(2.29)を平面波展開法(plane-wave expansion method)とよぶ。平面波展開法は、「ほとんど自由な電子の近似」の一般化に対応しており、周期ポテンシャルが小さい場合に有効な方法と言われている。一方、周期ポテンシャル  $V(\mathbf{r})$  には、経験的に求められた擬ポテンシャル(経験的擬ポテンシャル)を用いる。経験的擬ポテンシャルは、結晶を構成する原子毎に与える必要があるが、後で紹介するように、代表的な半導体に対しては具体的な値が公表されている。平面波展開法と(経験的)擬ポテンシャル法を組み合わせたバンド計算法は、2.1 でも述べたように、内殻の電子状態を計算せずに固体の電子状態として重要な価電子の状態だけを計算するように計算を効率化することが可能であり、**第一原理計算法(3章)**でも広く採用されている。

さて式(2.29)を見ると、展開する波数ベクトル  $\mathbf{k}'$  は任意のベクトルを取り得るように思えるが、実際には、次項で説明するように、結晶の並進対称性からくる特定の条件を満たす必要があることから、展開に用いる波数ベクトルは**逆格子ベクトル**に限定されることが導かれる。

[問題 2.4] 式(2.28)を導出せよ。

### 2.3.1 並進対称性

固体結晶は、**格子ベクトル(lattice vector)  $\mathbf{R}_n$**  だけ座標を移動させると元の結晶と全てが重なり合う性質を持っている。これを**並進対称性(translational symmetry)**または**周期性(periodicity)**とよぶ。したがって、格子ベクトル  $\mathbf{R}_n$  は図 2.6 の**基本格子ベクトル(primitive lattice vector) ( $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ )**を用いて次式で与えられる。

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad : \quad \text{格子ベクトル} \quad (2.30)$$

ここで  $n = (n_1, n_2, n_3)$  は整数組を表す。また図 2.6 中の  $a$  は**格子定数(lattice constant)**である。式(2.30)のベクトルが示す座標の集まりを格子点という。基本格子ベクトル(3次元結晶の基本格子)は 14 種類のブラベ格子に分類される。3つの基本格子ベクトル  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  が作る平行 6 面体は 3次元空間を隙間なく埋める単位として、**単位胞(ユニットセル)**と呼ばれる。その単位胞の体積は  $\Omega = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$  で与えられる。ただし図 2.7 に示すように、単位胞はいろいろにとることができる。上に述べた平行 6 面体よりも立体としての対称性が高くなるように立体を構成し直して、それを単位と選ぶこともできる。体心立方格子や面心立方格子のように単位胞に 1つの原子だけが含まれている場合は、ある原子とその周辺の原子とを結ぶ線分の 2 等分面から作られる単位胞が最小体積になっており、これを**ウィグナー・ザイツ胞(Wigner-Seitz cell)**と呼んでいる。前節で述べたブリルアンゾーンは、逆格子空間におけるウィグナー・ザイツ胞に相当する。

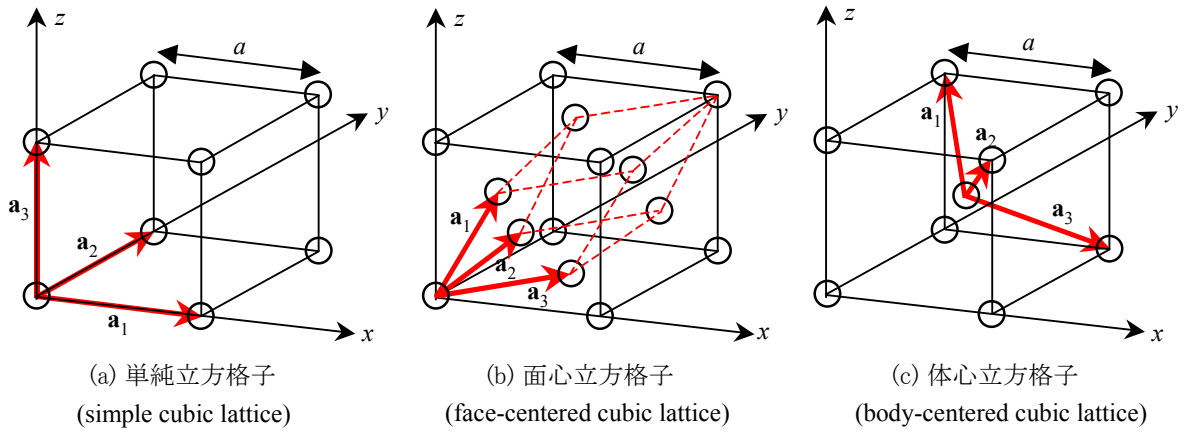


図 2.6 立方格子の基本格子ベクトル.  $a$  は格子定数を表す.

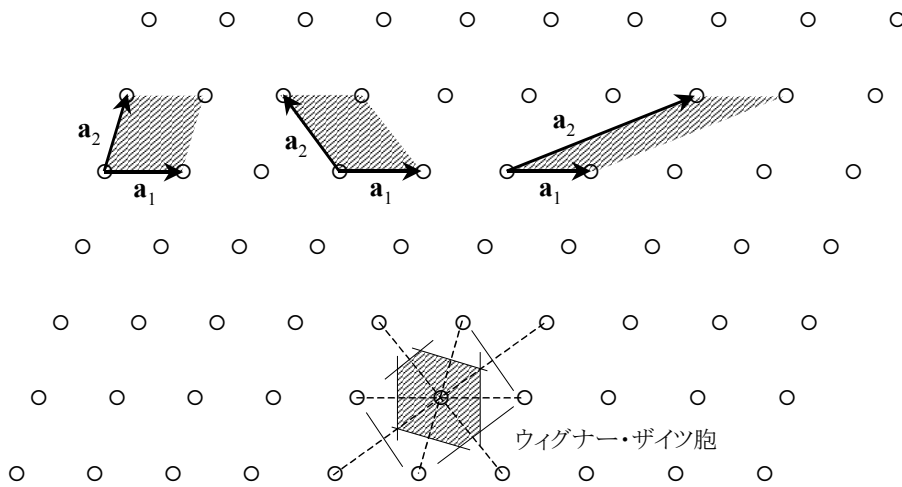


図 2.7 二次元格子のいろいろな単位胞.

### 2.3.2 逆格子ベクトル (reciprocal lattice vector)

ブロッホの周期関数  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  も、前項で述べた並進対称性を満たさないといけない。したがって平面波展開した式 (2.29) は  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)$  の条件を満たす必要がある。すなわち

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = \sum_{\mathbf{k}'} A_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)} = \sum_{\mathbf{k}'} A_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_n} = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.31)$$

となるためには、式(2.31)において

$$e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_n} = 1 \quad (2.32)$$

が成り立てば良い。これより、ブロッホの周期関数を平面波展開する際のその波数ベクトル  $\mathbf{k}'$  は、次の条件を満たす必要があることがわかる。

$$\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_n = 2\pi \times \text{整数} \quad (2.33)$$

式(2.33)の条件を満たす  $\mathbf{k}'$  ベクトルは逆格子ベクトルとよばれる。つまり、ブロッホの周期関数  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  が結晶の並進対称性を満たすように平面波展開するためには、逆格子ベクトルを用いて展開すれば良いことがわかる。逆格子ベクトルを  $\mathbf{K}_m$  と表して、これを式(2.30)の格子ベクトルと同様に、基本逆格子ベクトル  $(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3)$  と任意の整数組  $m = (m_1, m_2, m_3)$  を用いて

$$\mathbf{K}_m = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3 \quad : \quad \text{逆格子ベクトル} \quad (2.34)$$

と表現することにする。このとき、基本逆格子ベクトル  $(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3)$  は、実空間の基本格子ベクトル  $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$  (図 2.6 参

照)と

$$\mathbf{b}_j \cdot \mathbf{a}_i = 2\pi\delta_{ji} \quad (2.35)$$

の関係を満たす必要がある(問題 2.5)。これより、基本逆格子ベクトル  $\mathbf{b}$  は基本格子ベクトル  $\mathbf{a}$  から次式で計算することができる。

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad (2.36)$$

以上をまとめると、ブロッホの周期関数  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  は、逆格子ベクトル  $\mathbf{K}_m$  を持つ平面波を基底として次式のように展開すればよいことがわかる。

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_m A_{\mathbf{K}_m} e^{i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}} \quad (2.37)$$

[問題 2.5] 式(2.35)のもとで、 $\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{R}_n = 2\pi \times \text{整数}$  が成り立つことを確認せよ。

### 逆格子ベクトルの求め方

基本格子ベクトル $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$ -----> 基本逆格子ベクトル $(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3)$ -----> 逆格子ベクトル $\mathbf{K}_m$
式(2.36) <span style="margin-left: 200px;">式(2.34)</span>

[問題 2.6] 図 2.6 の 3 種類の立方格子に対して、基本逆格子ベクトル  $(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3)$  が次式となることを示しなさい。ただし、 $a$  は格子定数とする。

・単純立方格子(図 2.6(a))

$$\mathbf{a}_1 = a(1, 0, 0), \quad \mathbf{a}_2 = a(0, 1, 0), \quad \mathbf{a}_3 = a(0, 0, 1) \quad (2.38a)$$

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1, 0, 0), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(0, 1, 0), \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(0, 0, 1) \quad (2.38b)$$

・面心立方格子(図 2.6(b))

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(0, 1, 1), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(1, 0, 1), \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(1, 1, 0) \quad (2.39a)$$

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(-1, 1, 1), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(1, -1, 1), \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(1, 1, -1) \quad (2.39b)$$

・体心立方格子(図 2.6(c))

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(-1, 1, 1), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(1, -1, 1), \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(1, 1, -1) \quad (2.40a)$$

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(0, 1, 1), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(1, 0, 1), \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(1, 1, 0) \quad (2.40b)$$

[問題 2.7] 面心立方格子の逆格子ベクトルを、以下を参考にして実際に求めてみよ。

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_m &= m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3 \\ &= \frac{2\pi}{a} [m_1(-1, 1, 1) + m_2(1, -1, 1) + m_3(1, 1, -1)] \\ &= \frac{2\pi}{a} [(-m_1 + m_2 + m_3, m_1 - m_2 + m_3, m_1 + m_2 - m_3)] \end{aligned} \quad (2.41)$$

上式の  $m_1, m_2, m_3$  に実際に整数値を代入して、大きさの小さい順に並べると次のように求められる。

$$\mathbf{K}_0 = \frac{2\pi}{a} (0, 0, 0) : 1\text{個} \quad (2.42a)$$

$$\mathbf{K}_3 = \frac{2\pi}{a} (\pm 1, \pm 1, \pm 1) : 8\text{個} \quad (2.42b)$$

$$\mathbf{K}_4 = \frac{2\pi}{a} (\pm 2, 0, 0), \frac{2\pi}{a} (0, \pm 2, 0), \frac{2\pi}{a} (0, 0, \pm 2) : 6\text{個} \quad (2.42c)$$

$$\mathbf{K}_8 = \frac{2\pi}{a} (\pm 2, \pm 2, 0), \frac{2\pi}{a} (\pm 2, 0, \pm 2), \frac{2\pi}{a} (0, \pm 2, \pm 2) : 12\text{個} \quad (2.42d)$$

$$\mathbf{K}_{11} = \frac{2\pi}{a} (\pm 3, \pm 1, \pm 1), \frac{2\pi}{a} (\pm 1, \pm 3, \pm 1), \frac{2\pi}{a} (\pm 1, \pm 1, \pm 3) : 24\text{個} \quad (2.42e)$$

$$\mathbf{K}_{12} = \frac{2\pi}{a} (\pm 2, \pm 2, \pm 2) : 8\text{個} \quad (2.42f)$$

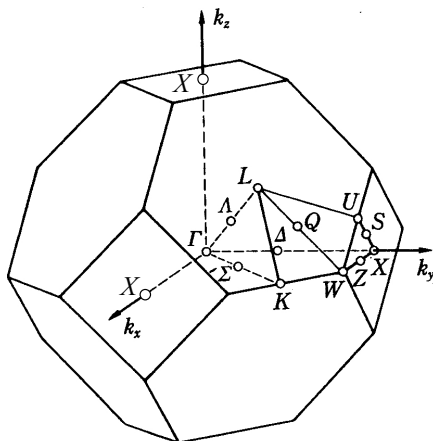
$$\mathbf{K}_{19} = \frac{2\pi}{a} (\pm 3, \pm 3, \pm 1), \frac{2\pi}{a} (\pm 3, \pm 1, \pm 3), \frac{2\pi}{a} (\pm 1, \pm 3, \pm 3) : 24\text{個} \quad (2.42g)$$

上記の  $\mathbf{K}$  に付けた添字は  $2\pi/a$  単位でのベクトルの大きさの 2 乗を表している。たとえば  $\mathbf{K}_3 = \frac{2\pi}{a} (\pm 1, \pm 1, \pm 1)$

の添字 3 は  $\sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2} = \sqrt{3}$  を表し、 $\mathbf{K}_4 = \frac{2\pi}{a} (\pm 2, 0, 0)$  の添字 4 は  $\sqrt{2^2 + 0^2 + 0^2} = \sqrt{4}$  を表す。式(2.41)で記した  $\mathbf{K}_m$  の  $m$  ではないことに注意されたい。

### 2.3.3 面心立方格子の第一ブリルアンゾーン

2.3.1 で述べたように、第一ブリルアンゾーンは逆格子空間におけるウィグナー・ザイツ胞である。ウィグナー・ザイツ胞は、ある(逆)格子とその周辺の(逆)格子とを結ぶ線分の 2 等分面から作られるので、問題 2.7 で求められた逆格子



代表的な特殊点

$$\Gamma: (0, 0, 0), \quad X = \frac{2\pi}{a} (0, 1, 0)$$

$$L = \frac{2\pi}{a} \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right), \quad W = \frac{2\pi}{a} \left( \frac{1}{2}, 1, 0 \right)$$

$$K = \frac{2\pi}{a} \left( \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0 \right), \quad U = \frac{2\pi}{a} \left( \frac{1}{4}, 1, \frac{1}{4} \right)$$

上記は第一象限での座標を示す。  
他の象限も等価であり、同じ特殊点記号が使われる。

図 2.8 面心立方格子の第一ブリルアンゾーン。

ベクトルを使って、面心立方格子のウィグナー・ザイツ胞を求めると、次の図 2.8 のようになる。

### 2.3.4 シュレディンガー方程式の平面波展開表示

2.3.2 で議論したように、ブロッホの周期関数  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  は逆格子ベクトル  $\mathbf{K}_n$  を持つ平面波基底で次のように展開することができる。

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_n A_{\mathbf{K}_n} e^{i\mathbf{K}_n \cdot \mathbf{r}} \quad (2.43)$$

これをシュレディンガー方程式(2.28)に代入し、左から  $e^{-i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}}$  をかけて結晶の体積  $V_c$  で積分すると、次の固有値方程式が得られる(問題 2.8)。

$$\frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{K}_m|^2 A_{\mathbf{K}_m} + \sum_n V(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) A_{\mathbf{K}_n} = E_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{K}_m} \quad (2.44)$$

ここで

$$V(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) = \frac{1}{V_c} \int_{V_c} V(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (2.45)$$

はポテンシャルの行列要素である。式(2.44)は平面波展開されたシュレディンガー方程式ともよばれ、これを解くことで求まる固有値  $E_{\mathbf{k}}$  が、いわゆる結晶のバンド構造になる。式(2.44)と(2.45)が経験的擬ポテンシャル法の基本式であり、

- ・対象とする物質の結晶構造(面心立方格子など)の情報は逆格子ベクトル  $\mathbf{K}_m$ 、 $\mathbf{K}_n$  に
- ・構成原子の種類はポテンシャルの行列要素  $V(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n)$  に

それぞれ考慮されている。

[問題 2.8] 式(2.44)を導出せよ。

### 2.3.5 空格子バンド

上で述べたように、結晶を構成する原子の情報はポテンシャル行列要素  $V(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n)$  に含まれており、これを経験的なパラメータで与えるのが経験的擬ポテンシャル法である。「経験的」の意味は、バンドギャップや有効質量などの値が実験値に一致するように擬ポテンシャルを決定した、ということを表している(ちなみに、経験的ではなく、非経験的に擬ポテンシャルを定めて電子状態を計算する手法を、**第一原理計算法**とよんでいる)。経験的擬ポテンシャルの導入は次項で詳しく述べることとして、本項では、物質の結晶構造(= $\mathbf{K}_m$ )を反映したバンド構造やブリルアンゾーンの特異点( $\Gamma$ 、L、X 点など)を学ぶために、**空格子バンド**(empty lattice band)について講述する。実際のバンド構造の大まかな傾向は、この空格子バンドで表現されることを理解して欲しい。

空格子とは、式(2.44)において周期ポテンシャルの大きさをゼロとした極限( $V(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) = 0$ )を意味する。したがって、このときのエネルギー固有値  $E_{\mathbf{k}}$  は式(2.44)より

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{K}_m|^2 \quad (2.46)$$

となる。すなわち、各逆格子ベクトル  $\mathbf{K}_m$  に対応してエネルギー分散関係(バンド構造)が決まることがわかる。では実際に、面心立方格子の空格子バンドを求めてみよう。

面心立方格子の逆格子ベクトルは問題 2.7 の式(2.42)で与えられるので、これらを用いて L -  $\Gamma$  - X 方向の空格子バンドを以下で求めてみる。



## 面心立方格子の空格子バンド

### [1] $\Gamma - X$ 方向 ( $\langle 100 \rangle$ 方向)

この方向では  $k_y = k_z = 0$  であるので、式(2.46)は  $k_x$  の関数として

$$E_{k_x} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x + K_m^x)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} (K_m^y)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} (K_m^z)^2 \quad (2.47)$$

となる。上式に式(2.42)で与えられた逆格子ベクトルを順次代入する。

$$\mathbf{K}_0: E_{k_x}^0(\Gamma - X) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} \equiv E_{k_x}^0 \quad (2.48)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_3: E_{k_x}^3(\Gamma - X) &= \frac{\hbar^2}{2m} \left( k_x \pm \frac{2\pi}{a} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \pm \frac{2\pi}{a} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \pm \frac{2\pi}{a} \right)^2 \\ &= \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m} \left( k_x + \frac{2\pi}{a} \right)^2 + 2 \times \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi}{a} \right)^2 \equiv E_{k_x}^{3(1)} \\ \frac{\hbar^2}{2m} \left( k_x - \frac{2\pi}{a} \right)^2 + 2 \times \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi}{a} \right)^2 \equiv E_{k_x}^{3(2)} \end{cases} \end{aligned} \quad (2.49)$$

$$\mathbf{K}_4: E_{k_x}^4(\Gamma - X) = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m} \left( k_x \pm 2 \frac{2\pi}{a} \right)^2 \equiv E_{k_x}^{4(1+)}, E_{k_x}^{4(1-)} \\ \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \pm 2 \frac{2\pi}{a} \right)^2 = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + 4E_0 \equiv E_{k_x}^{4(2)} \\ \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \pm 2 \frac{2\pi}{a} \right)^2 = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + 4E_0 \equiv E_{k_x}^{4(2)} \end{cases} \quad (2.50)$$

ここで

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi}{a} \right)^2 \quad (2.51)$$

とおいている。

### [2] $\Gamma - L$ 方向 ( $\langle 111 \rangle$ 方向)

この方向では式(2.46)は  $k_x, k_y, k_z$  の関数となり

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x + K_m^x)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} (k_y + K_m^y)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} (k_z + K_m^z)^2 \quad (2.52)$$

と表される。上と同様にして

$$\mathbf{K}_0: E_{\mathbf{k}}^0(\Gamma - L) = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \equiv E_{\mathbf{k}}^0 \quad (2.53)$$

$$\mathbf{K}_3: E_{\mathbf{k}}^3(\Gamma - L) = \frac{\hbar^2}{2m} \left( k_x \pm \frac{2\pi}{a} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left( k_y \pm \frac{2\pi}{a} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left( k_z \pm \frac{2\pi}{a} \right)^2 \equiv E_{\mathbf{k}}^{3(+)}, E_{\mathbf{k}}^{3(-)} \quad (2.54)$$

$$\mathbf{K}_4: E_{\mathbf{k}}^4(\Gamma - L) = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m} \left( k_x \pm \frac{4\pi}{a} \right)^2 + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \equiv E_{\mathbf{k}}^{4(+)}, E_{\mathbf{k}}^{4(-)} \\ \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m} \left( k_y \pm \frac{4\pi}{a} \right)^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \equiv E_{\mathbf{k}}^{4(+)}, E_{\mathbf{k}}^{4(-)} \\ \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m} \left( k_z \pm \frac{4\pi}{a} \right)^2 \equiv E_{\mathbf{k}}^{4(+)}, E_{\mathbf{k}}^{4(-)} \end{cases} \quad (2.55)$$

が求まる。

上で得られた各エネルギー分散関係を L -  $\Gamma$  - X に沿って描くと図 2.9 のようになる。バンドギャップを持たないバンド構造ではあるが、実際のバンド構造と比較すると、その大まかな傾向は表現されていることが分かる。そして実際のバンド構造と空格子バンドを比較すると、周期ポテンシャル  $V(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n)$  には主に次のような役割があることが理解できる。

- (1) バンドギャップの有無とその大きさの決定
- (2) 直接遷移型と間接遷移型の区別
- (3) 伝導帯下端および価電子帯上端の曲率、すなわち電子と正孔の有効質量

[問題 2.9] 図 2.9 中の各曲線が、式(2.47) ~ (2.55)のどの式に対応するか図中に記入せよ。また、X 点と L 点の矢印で示した点のエネルギー値を  $E_0$  単位で求めよ。

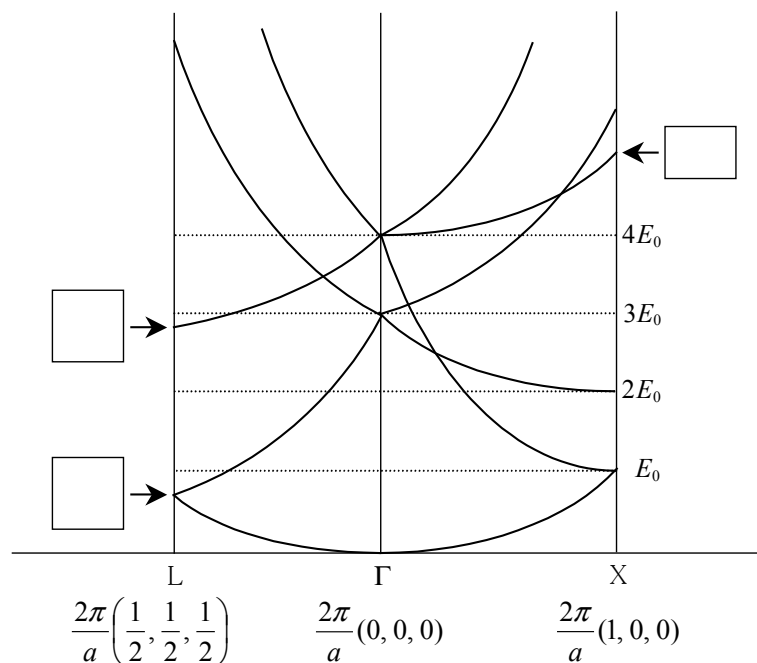


図 2.9 面心立方格子の空格子バンド ( $\mathbf{K}_0 \sim \mathbf{K}_4$ ).

## 二波近似

一般的に式(2.44)は、 $V(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \neq 0$  の時には解析的に解くことができない。ただし、2本の曲線が交わる所では以下の二波近似を用いると解析的に解くことができる。例として図 2.10 に空格子バンドの最低バンド付近を  $\Gamma$ -X 間で拡大したものを示している。この図の白丸で示した X 点における  $E_{k_x}^0$  と  $E_{k_x}^{4(1)}$  の二つのバンドに注目する。このとき原子が作る周期的ポテンシャルの影響を取り入れると、X 点におけるこれら二つのバンドの縮退が解けバンドギャップが開くことを以下で示す。

平面波展開されたシュレディンガー方程式(2.44)を以下に示す。

$$\frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{K}_m|^2 A_{\mathbf{K}_m} + \sum_n V(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) A_{\mathbf{K}_n} = E_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{K}_m}$$

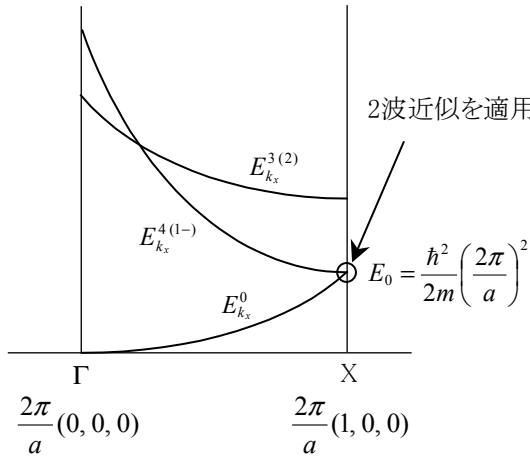


図 2.10 二波近似.

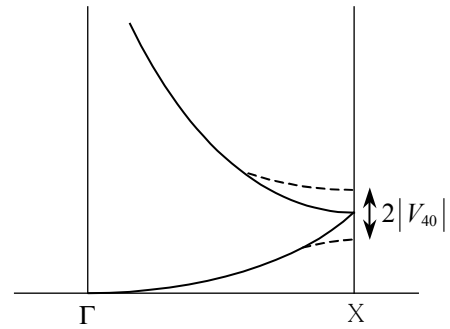


図 2.11 バンドギャップ.

X 点を考えるので  $\mathbf{k} = 2\pi/a(1, 0, 0)$  である。ここで、 $m=0, 4$  の二波近似を行うと上記のシュレディンガー方程式から、次の二つの式が得られる。

$$\mathbf{K}_m = \mathbf{K}_0 = \frac{2\pi}{a}(0, 0, 0) : \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi}{a} \right)^2 A_{\mathbf{K}_0} + V(\mathbf{K}_0 - \mathbf{K}_4) A_{\mathbf{K}_4} = E_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{K}_0} \quad (2.56a)$$

$$\mathbf{K}_m = \mathbf{K}_4 = \frac{2\pi}{a}(-2, 0, 0) : \frac{\hbar^2}{2m} \left( -\frac{2\pi}{a} \right)^2 A_{\mathbf{K}_4} + V(\mathbf{K}_4 - \mathbf{K}_0) A_{\mathbf{K}_0} = E_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{K}_4} \quad (2.56b)$$

ここで  $V(\mathbf{K}_0 - \mathbf{K}_0) = V(\mathbf{K}_4 - \mathbf{K}_4) = V(0) = 0$  とおいた。これらを行列方程式で表すと

$$\begin{pmatrix} E_0 - E_{\mathbf{k}} & V_{04} \\ V_{40} & E_0 - E_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{\mathbf{K}_0} \\ A_{\mathbf{K}_4} \end{pmatrix} = 0, \quad \text{ただし } E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi}{a} \right)^2 \quad (2.57)$$

となる。ここで

$$V_{04} = V(\mathbf{K}_0 - \mathbf{K}_4), \quad V_{40} = (V_{04})^* \quad (2.58)$$

であるので、これらの関係を使って式(2.57)を解くと、エネルギー固有値は次のように二つの異なる値を持つことが分かる。

$$E_{\mathbf{k}} = E_0 \pm |V_{40}| \quad (2.59)$$

すなわち X 点において、ポテンシャル行列要素の絶対値の 2 倍で決まるバンドギャップが開くことがわかる。この様子を模式的に描いたのが図 2.11 である。このように、原子が作る周期的ポテンシャルの影響を取り入れると、エネルギーの縮退が解け分散曲線にバンドギャップが開くことが説明できる。

[問題 2.10] L 点の最低バンドに二波近似を適用したときのエネルギー固有値を求めよ。

### 2.3.6 経験的擬ポテンシャル

ここからは二波近似ではなく、ポテンシャル行列要素  $V(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n)$  に経験的擬ポテンシャルを導入し、実際のバンド構造を計算する手法について詳述する。いま、図 2.12 に示すように格子ベクトル  $\mathbf{R}_j$  の位置に原子が配置されるとし、各原子が持つクーロンポテンシャル(他の電子からの影響が入った)を  $v(\mathbf{r})$  とおくと、すべての原子で作られる結晶中の周期ポテンシャル  $V(\mathbf{r})$  は

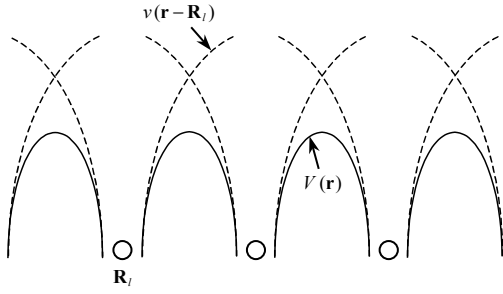


図 2.12 周期ポテンシャルの表現.

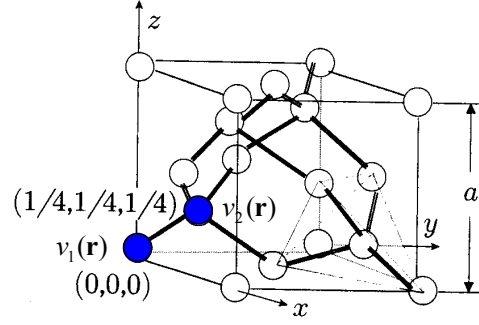


図 2.13 ダイヤモンド構造. シリコン原子を結ぶ結合枝 (bond) は各原子に共有された 2 個の電子を意味する.

$$V(\mathbf{r}) = \sum_l v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) \quad (2.60)$$

と表される。ここで  $\mathbf{r}$  は電子の座標ベクトルを表している。これをポテンシャルの行列要素(2.45)に代入すると

$$\begin{aligned} V(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) &= \frac{1}{V_c} \int_{V_c} \sum_l v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) e^{-i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{V_c} \sum_l e^{-i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \mathbf{R}_l} \int_{V_c} d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \mathbf{R}_l} v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) e^{-i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \mathbf{r}} \\ &= \frac{1}{V_c} \sum_l e^{-i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \mathbf{R}_l} \int_{V_c} d\mathbf{r} e^{-i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)} v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) \end{aligned} \quad (2.61)$$

となる。本項ではシリコンを取り上げることにする。シリコンは、図 2.13 に示すダイヤモンド構造をとることが知られている。ダイヤモンド構造は図 2.6(b)の面心立方格子と、それらの原子から  $(a/4, a/4, a/4)$  ずれた位置にあるもう一つの面心立方格子からなる。その結果、どのシリコン原子をとってもその周囲には必ず 4 個のシリコン原子が正四面体の頂点の位置に、すなわち中心の原子から等距離の位置に立体的に配置されている。シリコン原子を結ぶ結合枝 (bond) は各原子にお互いに共有された 2 個の電子を意味する。これを共有結合 (covalent bonding) とよぶ。このように 2 つの面心立方格子からなるダイヤモンド構造の場合、 $(0, 0, 0)$  と  $(a/4, a/4, a/4)$  に位置する 2 つの原子を囲む単位胞で考えることができる。

式の表現を簡単にするために、この単位胞の中の二つの原子の midpoint を位置座標の原点にとることにする。このとき、二つの原子の格子ベクトルは

$$\mathbf{R}_1^1 = a \left( \frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8} \right) \equiv \boldsymbol{\tau}, \quad \mathbf{R}_1^2 = -a \left( \frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8} \right) = -\boldsymbol{\tau} \quad (2.62)$$

とおけるので、これらを式(2.61)に用いると

$$\begin{aligned} V(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) &= \sum_l \frac{1}{V_c} \left[ e^{-i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \boldsymbol{\tau}} \int_{V_c} d\mathbf{r} e^{-i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot (\mathbf{r} - \boldsymbol{\tau})} v_1(\mathbf{r} - \boldsymbol{\tau}) + e^{i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \boldsymbol{\tau}} \int_{V_c} d\mathbf{r} e^{-i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot (\mathbf{r} + \boldsymbol{\tau})} v_2(\mathbf{r} + \boldsymbol{\tau}) \right] \\ &= e^{-i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \boldsymbol{\tau}} \frac{N}{V_c} \int_{\Omega} d\mathbf{r}' e^{-i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \mathbf{r}'} v_1(\mathbf{r}') + e^{i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \boldsymbol{\tau}} \frac{N}{V_c} \int_{\Omega} d\mathbf{r}' e^{-i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \mathbf{r}'} v_2(\mathbf{r}') \\ &= e^{-i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \boldsymbol{\tau}} \underbrace{\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d\mathbf{r}' e^{-i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \mathbf{r}'} v_1(\mathbf{r}')}_{V_1(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n)} + e^{i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \boldsymbol{\tau}} \underbrace{\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d\mathbf{r}' e^{-i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \mathbf{r}'} v_2(\mathbf{r}')}_{V_2(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n)} \end{aligned} \quad (2.63)$$

となる。ここで  $\sum_{\mathbf{r}}$  は単位胞の和を意味しており、上式の3行目では、単位胞の体積  $\Omega$  とその数  $N$  が結晶の体積  $V_c$  と  $N\Omega = V_c$  の関係があることを利用している。また、各原子によるポテンシャルであることを明示するためにポテンシャル変数に添え字 1, 2 を付けている。ここで

$$V_1(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d\mathbf{r}' e^{-i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n)\mathbf{r}'} v_1(\mathbf{r}') \quad , \quad V_2(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d\mathbf{r}' e^{-i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n)\mathbf{r}'} v_2(\mathbf{r}') \quad (2.64)$$

とおいて式(2.63)を展開し整理すると

$$\begin{aligned} V(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) &= e^{-i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n)\boldsymbol{\tau}} V_1(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) + e^{i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n)\boldsymbol{\tau}} V_2(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \\ &= [V_1(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) + V_2(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n)] \cos[(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \boldsymbol{\tau}] \\ &\quad - i [V_1(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) - V_2(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n)] \sin[(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \boldsymbol{\tau}] \end{aligned} \quad (2.65)$$

となる。ここで式(2.65)の各因子の物理的意味を分かりやすくするために、各因子を次のような記号で表すことにする。

$$V_1(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) + V_2(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \equiv F^s(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \quad , \quad V_1(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) - V_2(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \equiv F^a(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \quad (2.66)$$

$$\cos[(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \boldsymbol{\tau}] \equiv S^s(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \quad , \quad \sin[(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \boldsymbol{\tau}] \equiv S^a(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \quad (2.67)$$

このとき、解くべき固有値方程式は次のようにまとめられる。

$$\frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{K}_m|^2 A_{\mathbf{k}_m} + \sum_n V(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) A_{\mathbf{k}_n} = E_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}_m} \quad (2.68)$$

ここで、

$$V(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) = S^s(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) F^s(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) - i S^a(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) F^a(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \quad (2.69)$$

$$S^s(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) = \cos[(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \boldsymbol{\tau}] \quad , \quad S^a(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) = \sin[(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \boldsymbol{\tau}] \quad (2.70)$$

$$\boldsymbol{\tau} = a \left( \frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8} \right) \quad (2.71)$$

である。 $S^s, S^a$  は逆格子ベクトル  $\mathbf{K}_m, \mathbf{K}_n$  と原子の座標  $\boldsymbol{\tau}$  で決まることから構造因子(structure factor)とよばれ、計算しようとする物質の結晶構造が分かれば与えることができる。一方、 $F^s, F^a$  は式(2.66)と(2.64)で定義したように各原子のポテンシャルで決まるポテンシャル形状因子(potential form factor)であり、他の電子からの影響や多体的な交換相

表 2.1 代表的な半導体の擬ポテンシャル[2,3]

	$F_3^s$	$F_4^s$	$F_8^s$	$F_{11}^s$	$F_3^a$	$F_4^a$	$F_8^a$	$F_{11}^a$
Si	-0.211	0	0.04	0.08	0	0	0	0
Ge	-0.230	0	0.01	0.06	0	0	0	0
GaAs	-0.230	0	0.01	0.06	0.07	0.05	0	0.01
GaP	-0.249	0	0.017	0.083	0.081	0.055	0	0.003
InAs	-0.270	0	0.02	0.041	0.078	0.038	0	0.036
InSb	-0.250	0	0.01	0.044	0.049	0.038	0	0.01
ZnSe	-0.230	0	0.01	0.06	0.18	0.12	0	0.03
CdTe	-0.245	0	-0.015	0.073	0.089	0.084	0	0.006

(単位: リュードベリ = 13.6 eV)

(Ry: Rydberg)

関効果によるポテンシャル成分も含んでいるため、厳密な値を与えることは極めて難しい。そこで、バンドギャップや有効質量などの計算結果が実験値に合うようにポテンシャル形状因子を決める方法が用いられ、これを経験的擬ポテンシャル法とよぶ。代表的な半導体の擬ポテンシャルを表 2.1 に示している。ここで  $F_3^{s(a)} = F^{s(a)}(\mathbf{K}_3 - \mathbf{K}_0)$ 、 $F_4^{s(a)} = F^{s(a)}(\mathbf{K}_4 - \mathbf{K}_0)$ 、... を意味する。 $F_0^{s(a)} = F^{s(a)}(\mathbf{K}_0 - \mathbf{K}_0)$  が含まれない理由は後ほど述べる。

では次に、擬ポテンシャルのもとで式(2.68)を具体的に解く方法を説明する。シリコン(ダイヤモンド構造)の結晶構造を表すときの単位格子は面心立方格子なので、式(2.42)の逆格子ベクトルで式(2.68)を展開する。このとき  $F^s$  および  $F^a$  は大きな  $\mathbf{K}$  に対して減少するので、擬ポテンシャルのうち  $|\mathbf{K}|^2 > (2\pi/a)^2 \times 11$  のものは無視して良い。したがって、ここでは次の 51 個の逆格子ベクトルを用いて展開する。

$$\mathbf{K}_0 = \frac{2\pi}{a}(0, 0, 0) \quad (2.72a)$$

$$\mathbf{K}_3^1 = \frac{2\pi}{a}(1, 1, 1), \quad \mathbf{K}_3^2 = \frac{2\pi}{a}(1, 1, -1), \quad \mathbf{K}_3^3 = \frac{2\pi}{a}(1, -1, 1), \quad \mathbf{K}_3^4 = \frac{2\pi}{a}(1, -1, -1) \quad (2.72b)$$

$$\mathbf{K}_3^5 = \frac{2\pi}{a}(-1, 1, 1), \quad \mathbf{K}_3^6 = \frac{2\pi}{a}(-1, 1, -1), \quad \mathbf{K}_3^7 = \frac{2\pi}{a}(-1, -1, 1), \quad \mathbf{K}_3^8 = \frac{2\pi}{a}(-1, -1, -1)$$

$$\mathbf{K}_4^1 = \frac{2\pi}{a}(2, 0, 0), \quad \mathbf{K}_4^2 = \frac{2\pi}{a}(-2, 0, 0), \quad \mathbf{K}_4^3 = \frac{2\pi}{a}(0, 2, 0), \quad \mathbf{K}_4^4 = \frac{2\pi}{a}(0, -2, 0) \quad (2.72c)$$

$$\mathbf{K}_4^5 = \frac{2\pi}{a}(0, 0, 2), \quad \mathbf{K}_4^6 = \frac{2\pi}{a}(0, 0, -2)$$

$$\mathbf{K}_8^1 = \frac{2\pi}{a}(2, 2, 0), \quad \mathbf{K}_8^2 = \frac{2\pi}{a}(2, -2, 0), \quad \dots, \quad \mathbf{K}_8^{12} = \frac{2\pi}{a}(0, -2, -2) \quad (2.72d)$$

$$\mathbf{K}_{11}^1 = \frac{2\pi}{a}(3, 1, 1), \quad \mathbf{K}_{11}^2 = \frac{2\pi}{a}(3, 1, -1), \quad \dots, \quad \mathbf{K}_{11}^{24} = \frac{2\pi}{a}(-1, -1, -3) \quad (2.72e)$$

シリコンの場合、 $\mathbf{K}_{12}, \mathbf{K}_{19}$  と増やすと伝導帯底(X 谷付近)のバンド構造の不具合が改善される。このときの行列方程式を示すと次のようになる。

$$\begin{bmatrix} \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{K}_0|^2 & V(\mathbf{K}_0 - \mathbf{K}_3^1) & V(\mathbf{K}_0 - \mathbf{K}_3^2) & \dots & V(\mathbf{K}_0 - \mathbf{K}_4^1) & \dots & V(\mathbf{K}_0 - \mathbf{K}_{11}^{24}) \\ V(\mathbf{K}_3^1 - \mathbf{K}_0) & \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{K}_3^1|^2 & V(\mathbf{K}_3^1 - \mathbf{K}_3^2) & \dots & V(\mathbf{K}_3^1 - \mathbf{K}_4^1) & \dots & V(\mathbf{K}_3^1 - \mathbf{K}_{11}^{24}) \\ V(\mathbf{K}_3^2 - \mathbf{K}_0) & V(\mathbf{K}_3^2 - \mathbf{K}_3^1) & \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{K}_3^2|^2 & \dots & V(\mathbf{K}_3^2 - \mathbf{K}_4^1) & \dots & V(\mathbf{K}_3^2 - \mathbf{K}_{11}^{24}) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ V(\mathbf{K}_4^1 - \mathbf{K}_0) & V(\mathbf{K}_4^1 - \mathbf{K}_3^1) & V(\mathbf{K}_4^1 - \mathbf{K}_3^2) & \dots & \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{K}_4^1|^2 & \dots & V(\mathbf{K}_4^1 - \mathbf{K}_{11}^{24}) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ V(\mathbf{K}_{11}^{24} - \mathbf{K}_0) & V(\mathbf{K}_{11}^{24} - \mathbf{K}_3^1) & V(\mathbf{K}_{11}^{24} - \mathbf{K}_3^2) & \dots & V(\mathbf{K}_{11}^{24} - \mathbf{K}_4^1) & \dots & \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{K}_{11}^{24}|^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{\mathbf{K}_0} \\ A_{\mathbf{K}_3^1} \\ A_{\mathbf{K}_3^2} \\ \vdots \\ A_{\mathbf{K}_4^1} \\ \vdots \\ A_{\mathbf{K}_{11}^{24}} \end{bmatrix} = E_{\mathbf{k}} \begin{bmatrix} A_{\mathbf{K}_0} \\ A_{\mathbf{K}_3^1} \\ A_{\mathbf{K}_3^2} \\ \vdots \\ A_{\mathbf{K}_4^1} \\ \vdots \\ A_{\mathbf{K}_{11}^{24}} \end{bmatrix} \quad (2.73)$$

ただし、ポテンシャルの対角要素  $V(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_m)$  はエネルギーの基準を与えるのでここでは零とした。このため式

(2.69)より  $F^{s(a)}(\mathbf{K}_0 - \mathbf{K}_0) = F_0^{s(a)}$  は必要なくなり表 2.1 から除いている。

さらに擬ポテンシャルについては次のような対称性があることが分かる(問題 2.11)。

$$F^s(\mathbf{K}_3^1 - \mathbf{K}_0) = F^s(\mathbf{K}_3^2 - \mathbf{K}_0) = \dots = F^s(\mathbf{K}_3^8 - \mathbf{K}_0) = \dots \equiv F_3^s \quad (2.74a)$$

$$F^s(\mathbf{K}_3^1 - \mathbf{K}_3^2) = F^s(\mathbf{K}_3^1 - \mathbf{K}_3^3) = \dots = F^s(\mathbf{K}_4^5 - \mathbf{K}_0) = \dots \equiv F_4^s \quad (2.74b)$$

$$F^s(\mathbf{K}_3^1 - \mathbf{K}_3^4) = F^s(\mathbf{K}_4^1 - \mathbf{K}_4^3) = \dots = F^s(\mathbf{K}_8^1 - \mathbf{K}_0) = \dots \equiv F_8^s \quad (2.74c)$$

$$F^s(\mathbf{K}_3^5 - \mathbf{K}_4^1) = F^s(\mathbf{K}_3^6 - \mathbf{K}_4^1) = \dots = F^s(\mathbf{K}_{11}^1 - \mathbf{K}_0) = \dots \equiv F_{11}^s \quad (2.74d)$$

.....

たとえば式(2.74a)からは、式(2.72b)で与えられる  $2\pi/a(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$  の形を持ち  $2\pi/a \times \sqrt{3}$  の大きさを持った同等な逆格子ベクトルに対する擬ポテンシャルは「対称性」によってすべて等しいことが導ける。これを  $F_3^s$  で表すことにする。同様に考えていけば、擬ポテンシャルは  $F_3^s, F_4^s, F_8^s, F_{11}^s$  と  $F_3^a, F_4^a, F_8^a, F_{11}^a$  の 8 個しか必要ないことが分かる。これらの具体的な値が表 2.1 に示されている。さらに表 2.1 で  $F_4^s = F_8^a = 0$  となっているが、これはたとえば、

$$S^s(\mathbf{K}_4^1 - \mathbf{K}_0) = \cos\left[\frac{2\pi}{a}(2, 0, 0) \times a\left(\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}\right)\right] = \cos\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0 \quad (2.75)$$

$$S^a(\mathbf{K}_8^1 - \mathbf{K}_0) = \sin\left[\frac{2\pi}{a}(2, 2, 0) \times a\left(\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}\right)\right] = \sin(\pi) = 0 \quad (2.76)$$

となるためそれらに対応する構造因子がゼロであることから、 $F_4^s$  と  $F_8^a$  を考える必要がないことを意味している。図 2.14 に、上述した経験的擬ポテンシャル法を用いて計算した代表的な半導体のバンド構造を示す。また付録 B には計算に用いたプログラムを添付している。経験的擬ポテンシャル法の理解の一助にしていきたい。

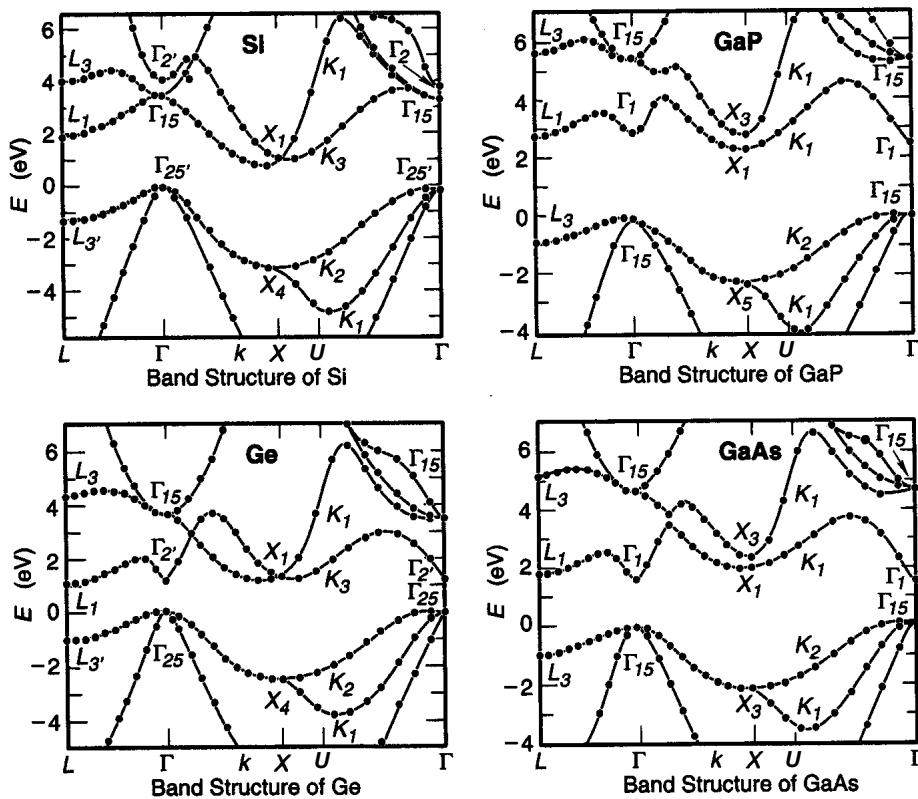


図 2.14 経験的擬ポテンシャル法により計算された半導体のバンド構造。

[問題 2.11] 式(2.74a)に示す擬ポテンシャルの対称性を証明せよ。

## 2.4 伝導帯最下端のバンド構造と有効質量近似

電子デバイス・光デバイスのキャリア輸送や光学特性に重要な役割を果たす伝導帯最下端付近の電子状態に注目する。図 2.14 から分かるように、GaAs の伝導帯最下端は $\Gamma$ 点に、Si のそれは X 点付近にある。これらの分散曲線は下に凸の形状をしていることから、**バレー(谷)**とよばれる。すなわち、 $\Gamma$ バレー、X バレーとよんでいる。一方の価電子帯最上端はどちらも $\Gamma$ 点にあるため、GaAs は直接遷移型、Si は間接遷移型となる。図 2.14 のバンド構造は、L -  $\Gamma$  - X - U -  $\Gamma$  の特殊点に沿ったエネルギー分散関係を描いているが、半導体中の電子は様々な散乱を受けて運動量とエネルギーを失うため、多くの電子は上で述べた伝導帯最下端付近に分布することになる。そのとき電子は 3 次元波数ベクトルを持つため、第一ブリルアンゾーン内を 3 次元分布するが、バンド構造が持つ異方性のために複雑な分布を示すことになる。このような 3 次元電子状態の特徴を示す手法として、伝導帯最下端バレーの**等エネルギー面 (equi-energy surface)**表示が用いられる。図 2.15 に GaAs と Si の伝導帯最下端バレーの等エネルギー面を示す。GaAs は $\Gamma$ 点に球状の等エネルギー面を持っており、その伝導帯最下端は等方的なバンド構造(isotropic bandstructure)であることが分かる。このエネルギー分散関係は、一種類の有効質量 $m^*$ を用いて次式のように放物線関数で近似することができる。

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{k_x^2}{m^*} + \frac{k_y^2}{m^*} + \frac{k_z^2}{m^*} \right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (2.77)$$

これを**有効質量近似 (effective mass approximation)** とよぶ。GaAs の場合、 $m^* = 0.067m_0$  である。 $m_0$  は自由電子質量を表す。これに対して Si では、X 点付近に回転楕円体(ellipsoidal)構造の等エネルギー面を持っており、非等方的なバンド構造 (anisotropic bandstructure) であることが分かる。このときのエネルギー分散関係は次式のように、二種類の有効質量( $m_l, m_t$ )を用いて近似することができる。

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{(k_x \pm k_0)^2}{m_l} + \frac{k_y^2}{m_t} + \frac{k_z^2}{m_t} \right] \quad k_x \text{ 軸上の 2 つの回転楕円体に対して} \quad (2.78)$$

ここで $k_0$ は回転楕円体の中心で、Si の場合は $k_0 \cong 0.85 \times (2\pi/a)$ になる。二種類の有効質量の値は、 $m_l = 0.19m_0$ と $m_t = 0.98m_0$ で与えられる。 $m_t$ を横有効質量、 $m_l$ を縦有効質量とよぶ。 $k_y$ および $k_z$ 軸上の残り 4 つの回転楕円体に対しても同様の式で記述することができる。

以上の議論は伝導帯最下端バレーに対するもので、それよりも高いエネルギーに位置する上位のバレーに対しては、異なる分散関係が成立する。たとえば GaAs の上位バレーは L 点と X 点付近にあることが図 2.14 から分かるが、その X 点の分散関係は式(2.78)で与えられる。ただし、 $m_l$ と $m_t$ の値は Si とは異なる。L 点の分散関係も回転軸方向を $k_x$ に選ぶと、式(2.78)で表すことができる。

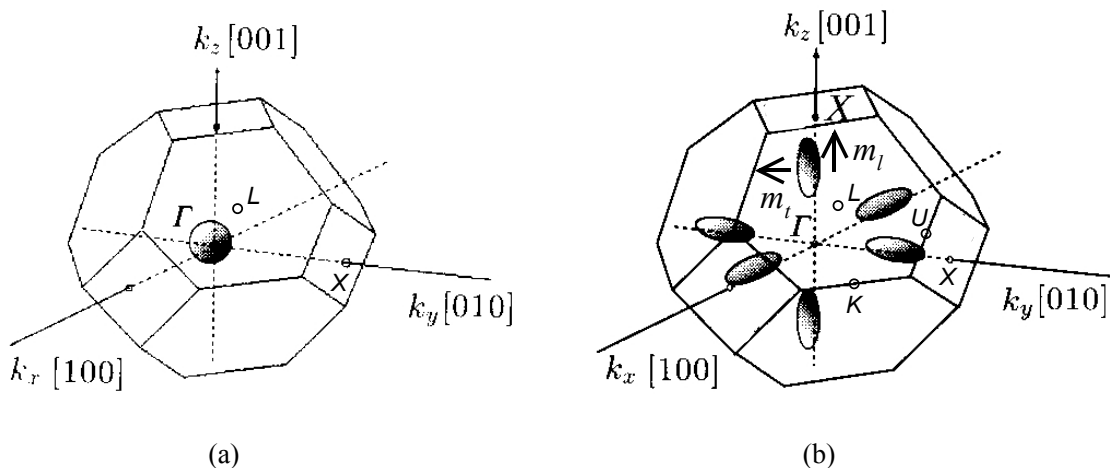


図 2.15 伝導帯最下端バンドの等エネルギー面. (a) GaAs と(b) Si.



上で述べたように Si の伝導帯は、非等方的で多谷構造(マルチバレー構造)をとる。このため Si-MOSFET はチャネル方向や基板の面方位により性能が大きく変化する。先端 MOSFET 研究では、この Si のバンド構造を巧みに制御して LSI の性能向上を実現させている。それらは**テクノロジーブースター**ともよばれており、5 章で詳しく紹介する。

#### 参考文献

- [1] L. Esaki and R. Tsu, "Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors," IBM J. Res. Develop. **14**, 61 (1970).
- [2] P.Y. ユー、M. カルドナ、“半導体の基礎”、シュプリンガー・フェアラーク東京 (1996).
- [3] 浜口智尋、“半導体物理”、朝倉書店 (2001).

## 付録 A. ブロッド振動

図 2.4 のバンド構造で、仮に電子が散乱を受けずに  $k = 0$  からブリルアンゾーンの端まで運動するとどうなるであろうか。図 A.1 には、こうした場合の電子の運動を描いている。電子は最もエネルギーの低い状態から分布し始めるため、ここでは基底バンドにある電子に注目する。

バンド構造 ( $E - k$  分散関係) から電子の群速度  $v_g$  が次式で定義される。

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k} \quad (\text{A.1})$$

群速度は電子波束の確率密度が移動する速度を表す。今、外力  $F$  がかかっているとする。このとき  $F$  によって電子が得たエネルギーの増加量  $dE$  は、式(A.1)を用いると

$$dE = F v_g dt = \frac{F}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k} dt \quad (\text{A.2})$$

となる。上式を整理すると、ニュートンの運動方程式によく似た次式を得る。

$$\frac{dk}{dt} = \frac{F}{\hbar} \quad (\text{A.3})$$

あるいは

$$\frac{d(\hbar k)}{dt} = F \quad (\text{A.4})$$

式(A.4)の左辺に現れる  $\hbar k$  は結晶中では運動量に対応しないが ( $p \neq \hbar k$ ; 後述)、ニュートンの運動方程式との類似性から  $\hbar k$  を**結晶運動量**とよんでいる。

次に、外力  $F$  による加速度  $a$  を求める。

$$\begin{aligned} a &= \frac{dv_g}{dt} = \frac{dv_g}{dk} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \frac{dk}{dt} \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} F \\ &\equiv \frac{F}{m^*} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

上式の第二式で定義した  $m^*$  が**有効質量**である。

$$m^* = \hbar^2 \left( \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \right)^{-1} \quad (\text{A.6})$$

上式から分かるように、有効質量は格子の周期性を反映したバンド構造の曲率で決まり、通常、自由電子質量 ( $m_0$ ) とは異なる値を示す。有効質量を式(A.6)で定めれば、結晶の周期ポテンシャル中を運動する電子を、ニュートンの法則に当てはめて議論することができるようになる。

以上の運動論に基づいて、電子が散乱を受けずに  $k = 0$  からブリルアンゾーンの端まで運動する場合を考察する。まず式(A.3)より、波数  $k$  の値は時間とともに大きくなる。ところが図 A.1(b)から分かるように、 $k$  が  $\pi/2a$  を過ぎたあたりから有効質量が負になり減速が始まり、ブリルアンゾーンの端に達すると群速度はゼロになる。その後さらに電界をかけ続けると、今度は、電子は負の方向(反対方向)に動き始める。なぜならば、 $k = \pi/a$  の点と  $k = -\pi/a$  の点は等価でありブリルアンゾーン

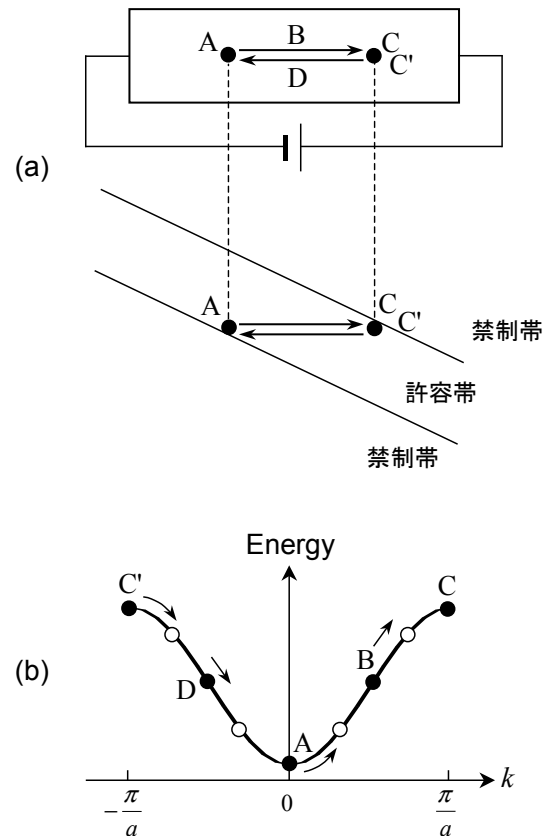


図 A.1 散乱がないと仮定した場合の電子の運動 (ブロッホ振動). (a)実空間、(b)波数空間.

の右端が左端につながるからである(図 2.3 参照)。これを電子がブラッグ反射を受けたと表現する。結局、図 A.1(a)にも示されているように、電子は元の位置に戻ってくることになり、実空間の限られた範囲を往復運動する。これをブロッホ振動という。

### ■ 結晶運動量

結晶中の電子の運動量期待値を計算してみよう。ただし、結晶中では電子の波動関数はブロッホ関数(式(2.3))で与えられることに注意が必要である。

$$\begin{aligned}
 \langle p_x \rangle &= \int \varphi_k^*(x) p_x \varphi_k(x) dx = \int e^{-ikx} u_k^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} [e^{ikx} u_k(x)] dx = \\
 &= \int e^{-ikx} u_k^*(x) \frac{\hbar}{i} \left[ ik e^{ikx} u_k(x) + e^{ikx} \frac{\partial u_k(x)}{\partial x} \right] dx \\
 &= \hbar k \underbrace{\int |u_k(x)|^2 dx}_1 + \int u_k^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial u_k(x)}{\partial x} dx \tag{A.7} \\
 &= \hbar k + \int u_k^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial u_k(x)}{\partial x} dx \\
 &\neq \hbar k
 \end{aligned}$$

このように一般には  $\langle p_x \rangle \neq \hbar k$  であり、結晶中では  $\hbar k$  は運動量に対応しない。ちなみに自由空間中(真空中)では  $u_k(x) = \text{定数}$  となるため、 $\langle p_x \rangle = \hbar k$  が成り立つ。

付録 B: 経験的擬ポテンシャル法によるバンド計算プログラム (Copyright by H. Tsuchiya. 無断転用を禁ずる.)

```

function[err]=band_pseudo

hb=1.055e-34;
m0=9.1e-31;
h2m=hb/2.0/m0*hb;
q=1.602e-19;
pi=3.1415926;

%%%%%%%%%% Setting Form Factors etc. (GaAs) %%%%%%%%%%%
F0s = 0.000*13.6*q ;
F3s = -0.230*13.6*q ;
F4s = 0.000*13.6*q ;
F8s = 0.010*13.6*q ;
F11s = 0.060*13.6*q ;
F0a = 0.000*13.6*q ;
F3a = 0.070*13.6*q ;
F4a = 0.050*13.6*q ;
F8a = 0.000*13.6*q ;
F11a = 0.010*13.6*q ;
a=5.65e-10;
tau=[a/8 a/8 a/8];

%%%%%%%%%% Setting Reciprocal Vectors %%%%%%%%%%%
g(1,:)=(2.0*pi/a)*[ 0.0 0.0 0.0]; % K0
g(2,:)=(2.0*pi/a)*[ 1.0 1.0 1.0]; % K3
g(3,:)=(2.0*pi/a)*[ 1.0 1.0 -1.0];
g(4,:)=(2.0*pi/a)*[ 1.0 -1.0 1.0];
g(5,:)=(2.0*pi/a)*[ 1.0 -1.0 -1.0];
g(6,:)=(2.0*pi/a)*[-1.0 1.0 1.0];
g(7,:)=(2.0*pi/a)*[-1.0 1.0 -1.0];
g(8,:)=(2.0*pi/a)*[-1.0 -1.0 1.0];
g(9,:)=(2.0*pi/a)*[-1.0 -1.0 -1.0];
g(10,:)=(2.0*pi/a)*[ 2.0 0.0 0.0]; % K4
g(11,:)=(2.0*pi/a)*[-2.0 0.0 0.0];
g(12,:)=(2.0*pi/a)*[ 0.0 2.0 0.0];
g(13,:)=(2.0*pi/a)*[ 0.0 -2.0 0.0];
g(14,:)=(2.0*pi/a)*[ 0.0 0.0 2.0];
g(15,:)=(2.0*pi/a)*[ 0.0 0.0 -2.0];

g(16,:)=(2.0*pi/a)*[ 2.0 2.0 0.0]; % K8
g(17,:)=(2.0*pi/a)*[ 2.0 -2.0 0.0];
g(18,:)=(2.0*pi/a)*[-2.0 2.0 0.0];
g(19,:)=(2.0*pi/a)*[-2.0 -2.0 0.0];
g(20,:)=(2.0*pi/a)*[ 2.0 0.0 2.0];
g(21,:)=(2.0*pi/a)*[ 2.0 0.0 -2.0];
g(22,:)=(2.0*pi/a)*[-2.0 0.0 2.0];
g(23,:)=(2.0*pi/a)*[-2.0 0.0 -2.0];
g(24,:)=(2.0*pi/a)*[ 0.0 2.0 2.0];
g(25,:)=(2.0*pi/a)*[ 0.0 2.0 -2.0];
g(26,:)=(2.0*pi/a)*[ 0.0 -2.0 2.0];
g(27,:)=(2.0*pi/a)*[ 0.0 -2.0 -2.0];
g(28,:)=(2.0*pi/a)*[ 3.0 1.0 1.0]; % K11
g(29,:)=(2.0*pi/a)*[ 3.0 1.0 -1.0];
g(30,:)=(2.0*pi/a)*[ 3.0 -1.0 1.0];
g(31,:)=(2.0*pi/a)*[ 3.0 -1.0 -1.0];
g(32,:)=(2.0*pi/a)*[-3.0 1.0 1.0];
g(33,:)=(2.0*pi/a)*[-3.0 1.0 -1.0];
g(34,:)=(2.0*pi/a)*[-3.0 -1.0 1.0];

```

```

g(35,:)=(2.0*pi/a)*[-3.0 -1.0 -1.0];
g(36,:)=(2.0*pi/a)*[ 1.0  3.0  1.0];
g(37,:)=(2.0*pi/a)*[ 1.0  3.0 -1.0];
g(38,:)=(2.0*pi/a)*[-1.0  3.0  1.0];
g(39,:)=(2.0*pi/a)*[-1.0  3.0 -1.0];
g(40,:)=(2.0*pi/a)*[ 1.0 -3.0  1.0];
g(41,:)=(2.0*pi/a)*[ 1.0 -3.0 -1.0];
g(42,:)=(2.0*pi/a)*[-1.0 -3.0  1.0];
g(43,:)=(2.0*pi/a)*[-1.0 -3.0 -1.0];
g(44,:)=(2.0*pi/a)*[ 1.0  1.0  3.0];
g(45,:)=(2.0*pi/a)*[ 1.0 -1.0  3.0];
g(46,:)=(2.0*pi/a)*[-1.0  1.0  3.0];
g(47,:)=(2.0*pi/a)*[-1.0 -1.0  3.0];
g(48,:)=(2.0*pi/a)*[ 1.0  1.0 -3.0];
g(49,:)=(2.0*pi/a)*[ 1.0 -1.0 -3.0];
g(50,:)=(2.0*pi/a)*[-1.0  1.0 -3.0];
g(51,:)=(2.0*pi/a)*[-1.0 -1.0 -3.0];

%%%%%% Hamiltonian for Non-Diagonal Elements %%%%%%%
H=0.0;
for i1=1:51
    for j1=1:51
        gdif=(g(i1,:)-g(j1,:))*(g(i1,:)-g(j1,:))/(2.0*pi/a)/(2.0*pi/a);
        if gdif >= 10.9 & gdif <= 11.1
            forms = F11s ;
            forma = F11a ;
        elseif gdif >= 7.9 & gdif <= 8.1
            forms = F8s  ;
            forma = F8a  ;
        elseif gdif >= 3.9 & gdif <= 4.1
            forms = F4s  ;
            forma = F4a  ;
        elseif gdif >= 2.9 & gdif <= 3.1
            forms = F3s  ;
            forma = F3a  ;
        elseif gdif <= 0.1
            forms = F0s  ;
            forma = F0a  ;
        else
            forms = 0.0  ;
            forma = 0.0  ;
        end
        H(i1,j1)=cos((g(i1,:)-g(j1,:))*tau)*forms-i*sin((g(i1,:)-g(j1,:))*tau)*forma;
    end
end
%%%%%% Setting k-vectors for Dispersion Curve %%%%%%%
nk1=20;
dk1=(1.0*pi/a)/nk1;
for ik=1:nk1+1
    ddk=dk1*(ik-1);
    k(ik,:)=[ (pi/a)-ddk (pi/a)-ddk (pi/a)-ddk ]; % L→G
end
nk2=20;
dk2=(2.0*pi/a)/nk2;
for ik=nk1+2:nk1+nk2+1
    ddk=dk2*(ik-nk1-1);
    k(ik,:)=[ ddk 0.0 0.0 ]; % G→X
end
%%%%%% Calculating Eigen-Energies %%%%%%%
nk=nk1+nk2;
for ik=1:nk+1
    iknum(ik)=ik;
    for i1=1:51

```

```

        H(i1,i1)=h2m*(k(ik,:)+g(i1,:))*(k(ik,:)+g(i1,:))'; %H diagonal elements
    end
    [x, d]=eig(H);
    energ(:,ik)=sort(diag(d)/q);
end
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
e0=energ(4,nk1+1);
for ik=1:nk+1
    for i1=1:51
        energ(i1,ik)=energ(i1,ik)-e0;
        energ(i1,ik)=real(energ(i1,ik));
    end
end
end

iknum(:)=iknum(:)-(nk1+1);

kmax=max(iknum(:));
kmin=min(iknum(:));
ymax= 8.0;
ymin= -14.0;

figure;
plot(iknum,energ(1,:), 'k.', iknum,energ(2,:), 'k.', iknum,energ(3,:), 'k.', iknum,energ(4,:), 'k.', iknum,energ(5,:), 'k.', iknum,energ(6,:), 'k.', iknum,energ(7,:), 'k.', iknum,energ(8,:), 'k.', iknum,energ(9,:), 'k. ');
set(gca,'XLim',[kmin kmax])
set(gca,'YLim',[ymin ymax])
ylabel('Energy (eV)', 'FontSize', 14)
title('Band structure calculated by using empirical pseudo-potential method')

```

### 3章 第一原理計算法 ～シリコンナノ構造への適用例～

参考書：三好旦六、小川真人、土屋英昭、“ナノエレクトロニクス基礎”、培風館(2007)。

#### 3.1 ナノスケールシリコン薄膜の電子状態解析

図 3.1 に、計算に用いた(001)面シリコン薄膜のユニットセルを示す。(a)はシリコン層の上下の(001)面のダングリングボンドを水素原子で終端した水素終端モデル、(b)は $\alpha$ -クォーツ  $\text{SiO}_2$  結晶で終端した SOI (Silicon-On-Insulator)モデルである。(b)の $\alpha$ -クォーツ  $\text{SiO}_2$  結晶の最上部の酸素と最下部の酸素は水素で終端している。(a)、(b)ともに薄膜の上下は真空層で囲んでいる。SOI モデルの面内、つまり[100]および[010]方向のユニットセルの大きさは、水素終端モデルのその $\sqrt{2}$ 倍になっている。このため後で示すバンド構造では、両者の第一ブリルアンゾーンの大きさが異なってくる。図 3.1 のモデルでは、中央のシリコン薄膜の原子層は 5 となっており、その膜厚は両モデルとも約 0.6nm である。最近 1nm を切る SOI 薄膜が実際に作製され、MOSFET としての動作も確認されている。実際の  $\text{SiO}_2$  物質はアモルファスとなることが知られているが、第一原理計算法では、バルク  $\text{SiO}_2$  物質の代表的な結晶相であるクォーツ、クリストバライト、トリディマイトなどの結晶相をシリコン表面に堆積したモデルが用いられる。ここで紹介する計算結果は、 $\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{SiO}_2$  界面を構成し構造最適化計算によりユニットセル内のすべての原子が安定となる位置に収束した後、電子状態解析を行ったものである。図 3.2 はこのようにして得られた $\Gamma$ -X 方向([100]方向)のエネルギー分散曲線を示す。

まず、両モデルともに直接遷移型になっているのが特徴である。バルクシリコンは間接遷移型であるが、ナノ構造ではその特性が大きく変わる可能性を示唆している。このことは、図 3.3 に示すシリコン伝導帯の量子閉じ込め効果に基づいて定性的に理解することができる。図 3.3(a)には 6 つの回転楕円体が描かれているが、これらはバルクシリコンの伝導帯下端に現れる 6 つの等価なエネルギーバレーの等エネルギー面を表している。まず(001)面に電子波の閉じ込めが起こると、 $k_z$  軸方向の波数が量子化されるために、図 3.3(b)および(c)に示すように 6 つの等エネルギー面が量子化波数面上に折りたたまれる。ここで破線の 8 角形はバルクの第一ブリルアンゾーンを、実線の四角形は薄膜の第

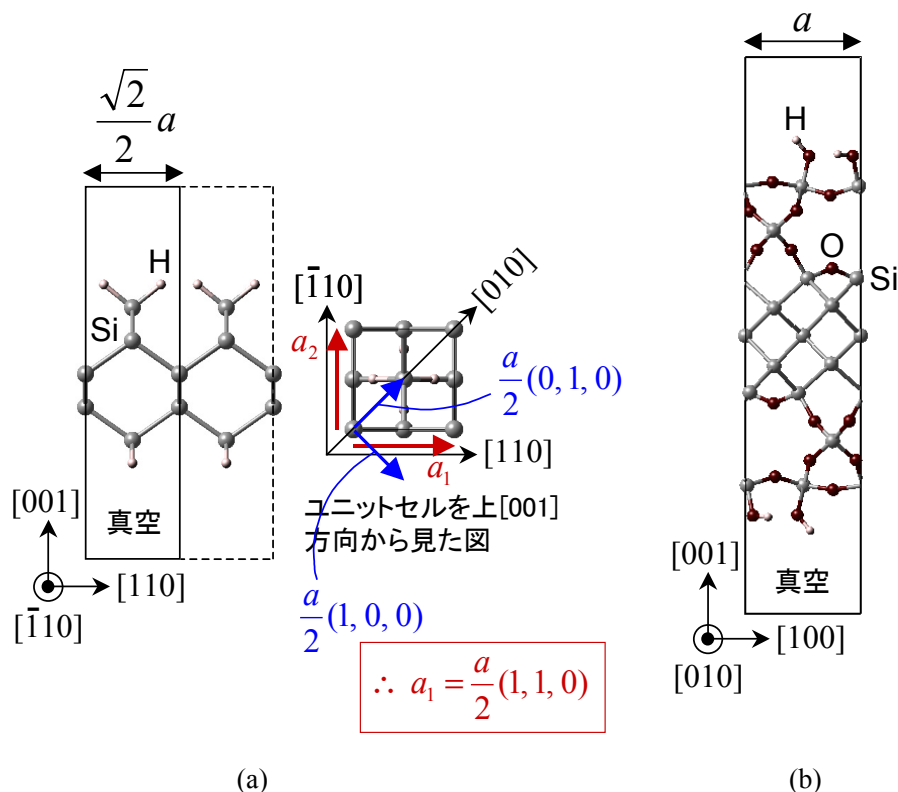


図 3.1 ナノスケールシリコン薄膜の計算モデル。(a)水素終端モデル、(b)SOI モデル。実線で囲まれた四角の領域が真空層を含むユニットセルを表す。シリコン膜厚は両モデルとも約 0.6nm である。

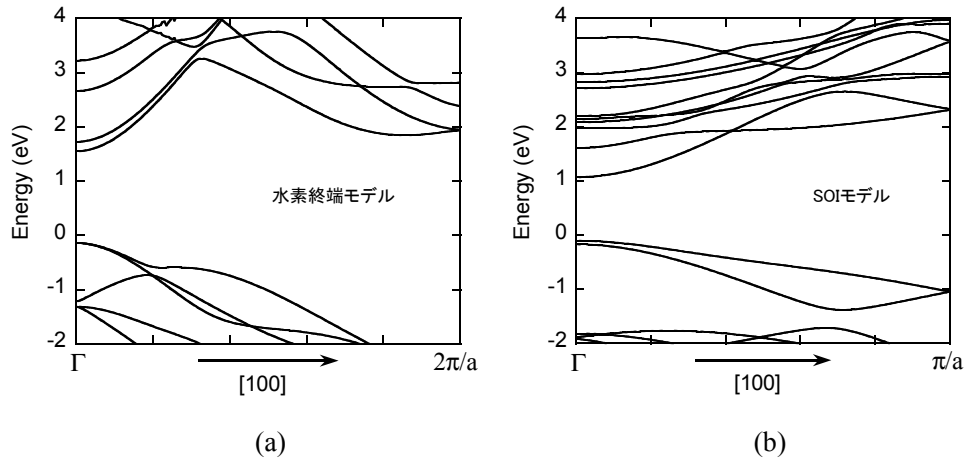


図 3.2 シリコン薄膜のバンド構造. (a)水素終端モデル、(b)SOI モデル.

第一ブリルアンゾーンを表している(問題 3.1)。SOI モデルの第一ブリルアンゾーンは $\Gamma$ -X 方向の大きさがバルクの半分になるため、折りたたまれた3~6のバレーは、図 3.3(c)に示すように4角形のブリルアンゾーン内に折り返し表示される。ここでバレー1と2は[001]方向に重いバルク有効質量(縦有効質量  $m_l$ )で閉じ込められるのに対して、バレー3~6は軽いバルク有効質量(縦有効質量  $m_t$ )で閉じ込められるために、 $\Gamma$ 点に折りたたまれたバレー1と2が基底量子化サブバンドを形成して直接遷移型になっている。ちなみに、 $\Gamma$ 点に折りたたまれた等価なバレー1と2は、相互作用により縮退が解けている(バレースプリッティング)。

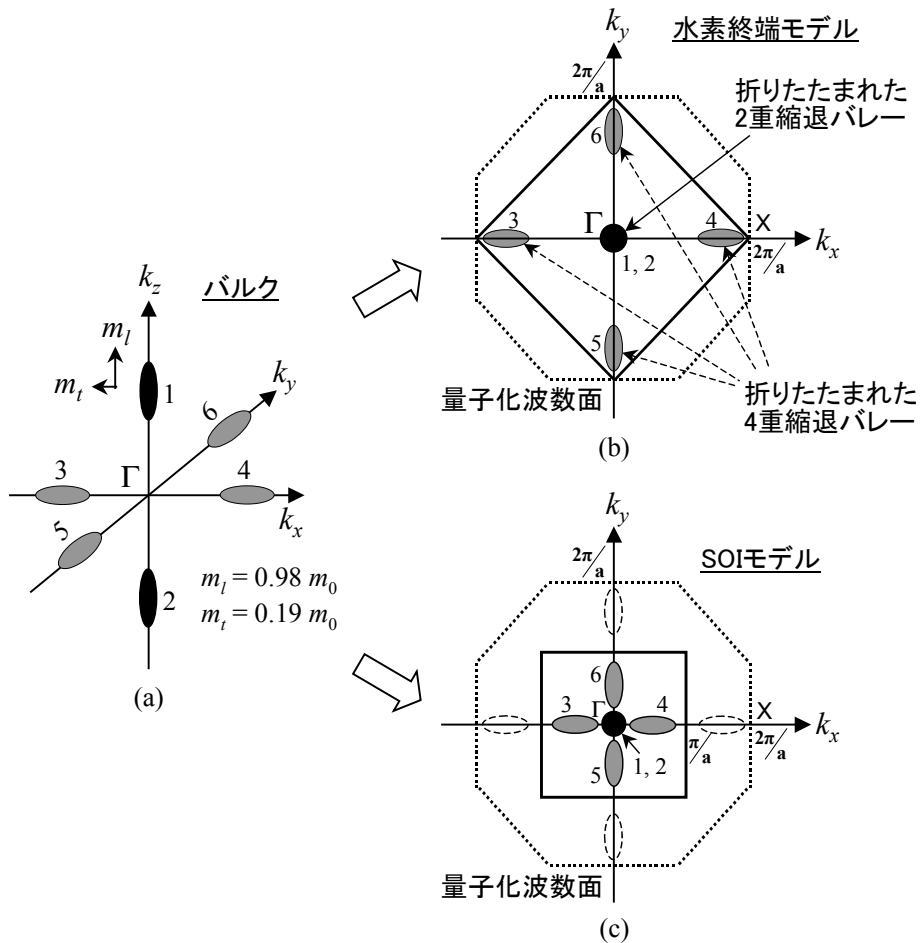


図 3.3 シリコン伝導帯の量子閉じ込め効果. (a)バルク、(b)水素終端モデル、(c)SOI モデル. (b)と(c)の破線の8角形はバルクの第一ブリルアンゾーンを、実線の4角形は薄膜の第一ブリルアンゾーンを表す. 薄膜の第一ブリルアンゾーンは図 3.1 のユニットセルから求めた.



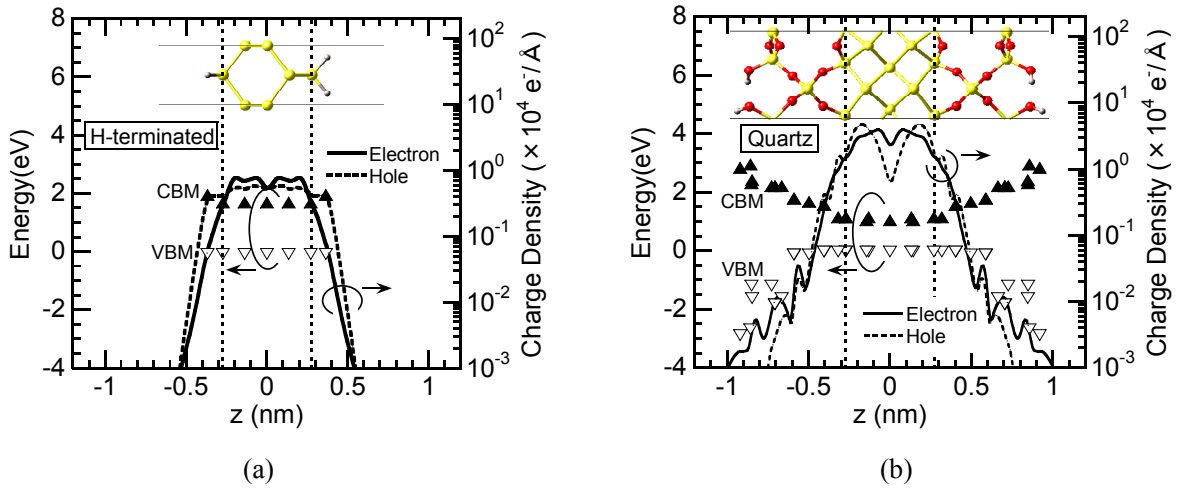


図 3.4 伝導帯最下端(CBM)と価電子帯最上端(VBM)エネルギーの空間分布と $\Gamma$ 点電荷密度分布. (a)水素終端モデル、(b)SOI モデル.

また、第一原理計算法で計算されたバンドギャップは実験値に比べて過小評価されることが知られており、このため図 3.2 のバンドギャップ値は量子化エネルギーが加わっているにも関わらず比較的小さな値になっている。さらに図 3.2(a)と(b)を詳細に比較すると、同じシリコン膜厚(約 0.6nm)であるにもかかわらず、SOI モデルのバンドギャップが小さく計算されている。これは、Si/ SiO<sub>2</sub> 界面でバンドギャップが徐々に変化する遷移層が形成されることが原因である。第一原理計算法では、個々の原子のまわりの局所状態密度を計算し、そこから読み取った価電子帯上端と伝導帯下端から界面に垂直な方向でのバンドギャップの空間変化を調べることができる。実際に計算した結果を図 3.4 に示す[1]。SOI モデルでは、SiO<sub>2</sub> 内でバンドギャップが緩やかに増大する遷移層が存在することが確認できる。特に、伝導帯(CBM)の方がゆっくりと変化している。その結果、電荷分布が SiO<sub>2</sub> 層へ浸み出し、実効的な膜厚が水素終端モデルに比べて大きくなっている(電子の方が浸み出し距離が長い)。したがって SOI モデルでは、Si 薄膜内の量子準位エネルギーが小さくなるため、バンドギャップは水素終端モデルに比べて小さくなる。バンドギャップの実験結果と比較すると、水素終端モデルはバンドギャップを過大評価するが、SOI モデルは実験結果と近い値を示すことが分かっており[1]、上記のような Si/ SiO<sub>2</sub> 界面の原子論的取り扱いが必要であることが分かる。

**[問題 3.1]** 図 3.3(b)と(c)に描かれた水素終端モデルと SOI モデルの第一ブリルアンゾーンを、図 3.1 のユニットセルから求めてみよ。

まず水素終端モデルで考える。図 3.1(a)のユニットセルから分かるように、水素終端の場合には薄膜内の周期性はバルク Si と同じである。いま  $z$  方向を閉じ込め方向とすると、図 3.1(a)の基本格子ベクトルは

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(1, 1, 0), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(-1, 1, 0), \quad \mathbf{a}_3 = l(0, 0, 1) \quad (3.1)$$

と表すことができる。ここで  $a$  はバルクの格子定数、 $l$  は閉じ込め方向のユニットセルの大きさを表す(真空層を十分に大きくとった場合  $l \rightarrow \infty$  と考えてよい)。式(3.1)に対する基本逆格子ベクトルは、次のように求められる。

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1, 1, 0), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(-1, 1, 0), \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{l}(0, 0, 1) \quad (3.2)$$

これを用いて[問題 2.7]と同様にして、逆格子ベクトルを具体的に計算すると

$$\mathbf{K}_m = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2 + m_3\mathbf{b}_3 = \left( \frac{2\pi}{a}(m_1 - m_2), \frac{2\pi}{a}(m_1 + m_2), \frac{2\pi}{l}m_3 \right) \quad (3.3)$$

より

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{a}(0, 0, 0) \quad (3.4)$$

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{a}(\pm 1, \pm 1, 0), \frac{2\pi}{l}(0, 0, \pm 1) \quad (3.5)$$

$$\mathbf{K} = \frac{4\pi}{a}(\pm 1, 0, 0), \frac{4\pi}{a}(0, \pm 1, 0), \left(\pm \frac{2\pi}{a}, \pm \frac{2\pi}{a}, \pm \frac{2\pi}{l}\right) \quad (3.6)$$

.....

が得られる。これら逆格子ベクトルのウィグナー・ザイツ胞を求めると図 3.3(b)の実線の 4 角形が得られる。

次に SOI モデルを考える。図 3.1(b)のユニットセルを見るとわかるように、SOI モデルの面内、つまり[100]および[010]方向のユニットセルの大きさは、 $\alpha$ -クォーツ  $\text{SiO}_2$  結晶の周期性からバルクの 2 倍になっている。このため、図 3.1(b)の基本格子ベクトルは

$$\mathbf{a}_1 = a(1, 0, 0), \mathbf{a}_2 = a(0, 1, 0), \mathbf{a}_3 = l(0, 0, 1) \quad (3.7)$$

となり、これらより基本逆格子ベクトルは次のように求められる。

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1, 0, 0), \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(0, 1, 0), \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{l}(0, 0, 1) \quad (3.8)$$

そして逆格子ベクトルを具体的に計算すると

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{a}(0, 0, 0) \quad (3.9)$$

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{a}(\pm 1, 0, 0), \frac{2\pi}{a}(0, \pm 1, 0), \frac{2\pi}{l}(0, 0, \pm 1) \quad (3.10)$$

$$\mathbf{K} = \left(\pm \frac{2\pi}{a}, \pm \frac{2\pi}{a}, 0\right), \left(\pm \frac{2\pi}{a}, 0, \pm \frac{2\pi}{l}\right), \left(0, \pm \frac{2\pi}{a}, \pm \frac{2\pi}{l}\right) \quad (3.11)$$

.....

が得られる。これらのウィグナー・ザイツ胞を求めると図 3.3(c)の実線の 4 角形が得られる。したがって SOI モデルでは、 $\Gamma$ -X 方向の第一ブリルアンゾーンの大きさがバルクの半分になることがわかる。

### 3.2 シリコンナノワイヤの電子状態解析

ナノスケールに微細化された MOSFET では、ドレイン電界がチャンネルに影響を与える短チャンネル効果が顕著になり、ゲートによる電流制御が困難になる。そこで、ゲート電極を多重化(マルチゲート化)してゲートの制御性を高めた新型構造デバイスの導入が検討されている。図 3.5 はその候補の一つである Fin 型 MOSFET、あるいは Tri-Gate MOSFET の構造を示す。立体的に作られたチャンネル層を絶縁膜を挟んでゲート電極が 3 方向から電流を制御するため短チャンネル効果の抑制に有効な構造と考えられている。これらの新型構造デバイスは、その断面サイズがナノスケールになるため、ナノワイヤ MOSFET ともよばれる。ナノワイヤ、すなわち量子細線では、その中を伝わる電子波の振る舞いはバルクと異なることが予想される。第一原理計算法は、このようなナノワイヤデバイスの性能予測にも力を発揮する [2,3]。

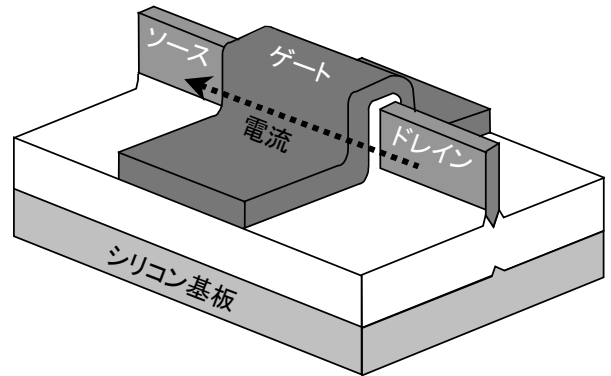


図 3.5 Fin 型 MOSFET の模式図.

図 3.6 に計算に用いたユニットセルを示す。シリコン表面はすべて水素原子で終端しており、その周りを真空層で囲んでいる。シリコンナノワイヤのデバイスへの応用を考える場合、構造の周りを絶縁体で囲むことが必要になるが、Fin 構造のように矩形型のナノワイヤでは角の部分で絶縁体の原子と接続させることが難しくなる。ナノワイヤでの絶縁体による終端モデルの構築は今後の課題である。シリコンナノワイヤ MOSFET のデバイス設計では、チャンネル方向の選択も重要な要素になる。そのため今回の計算では、ワイヤ方向が(a) [110]と(b) [112]方向をもつ 2 種類のシリコンナノワイヤを取り上げた。閉じ込め面と断面サイズは各モデル図中に示されている。

図 3.6 の各モデルに対するエネルギー分散曲線を図 3.7 に示す。横軸は各ワイヤ方向の波数である。図 3.7 から分かるようにワイヤ方向によりエネルギー分散曲線が大きく異なっており、特に[110]方向のナノワイヤは直接遷移型であるのに対して、[112]方向のナノワイヤは間接遷移型となっている。これは前節と同様に、シリコン伝導帯の量子閉じ込め効果で理解することができる。

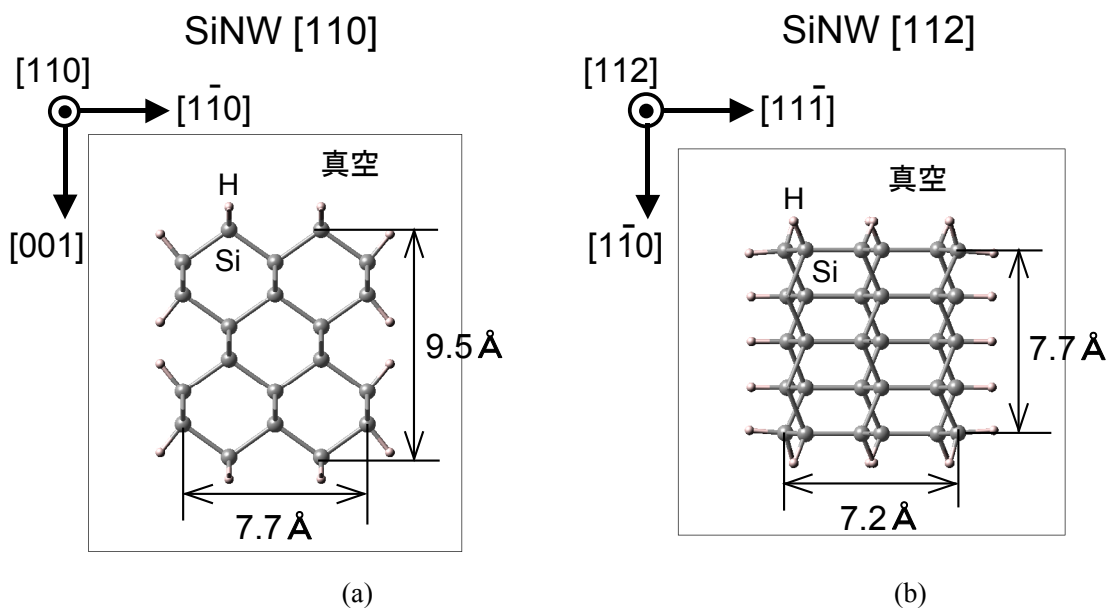


図 3.6 シリコンナノワイヤの計算モデル。実線の四角がユニットセルを表す。ワイヤ方向は、(a)[110]、(b)[112]である。それぞれ SiNW[110]と SiNW[112]とよぶことにする。閉じ込め面と断面サイズは各モデル図中に示されている。

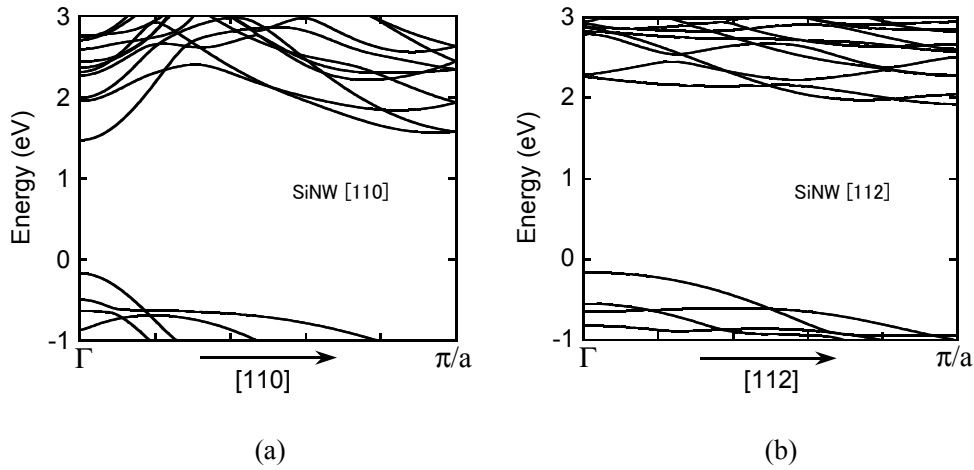


図 3.7 シリコンナノワイヤのバンド構造. (a)SiNW[110]、(b)SiNW[112].

図 3.8 にその模式図を示す。(a)が[110]方向ワイヤ、(b)が[112]方向ワイヤの伝導帯の量子閉じ込め効果を定性的に描いている。まず[110]方向のワイヤでは、 $(1\bar{1}0)$ 面で閉じ込めた電子波をさらに(001)面でも閉じ込めることになるので、図 3.8(a)の右図に示すように、 $\Gamma$ 点とX点付近にバレーが現れると考えられる。それらの中で[001]方向に重いバルク有効質量をもつ $\Gamma$ 点のバレーが基底量子化サブバンドを形成して直接遷移型となる。一方、[112]方向のワイヤでは、 $(11\bar{1})$ 面で閉じ込めた電子波をさらに $(1\bar{1}0)$ 面で閉じ込めたとしても、図 3.8(b)の右図に示すように $\Gamma$ 点にはバレーは生じず、X点付近に2つのバレーが形成されると考えられる。このため図 3.7(b)に示すように[112]方向のワイヤは、X点付近に2つのバレーをもつ間接遷移型となる。

このように図 3.6 に示す正方形に近いシリコンナノワイヤでは、そのバンド構造の概形をバルクのバンド構造から

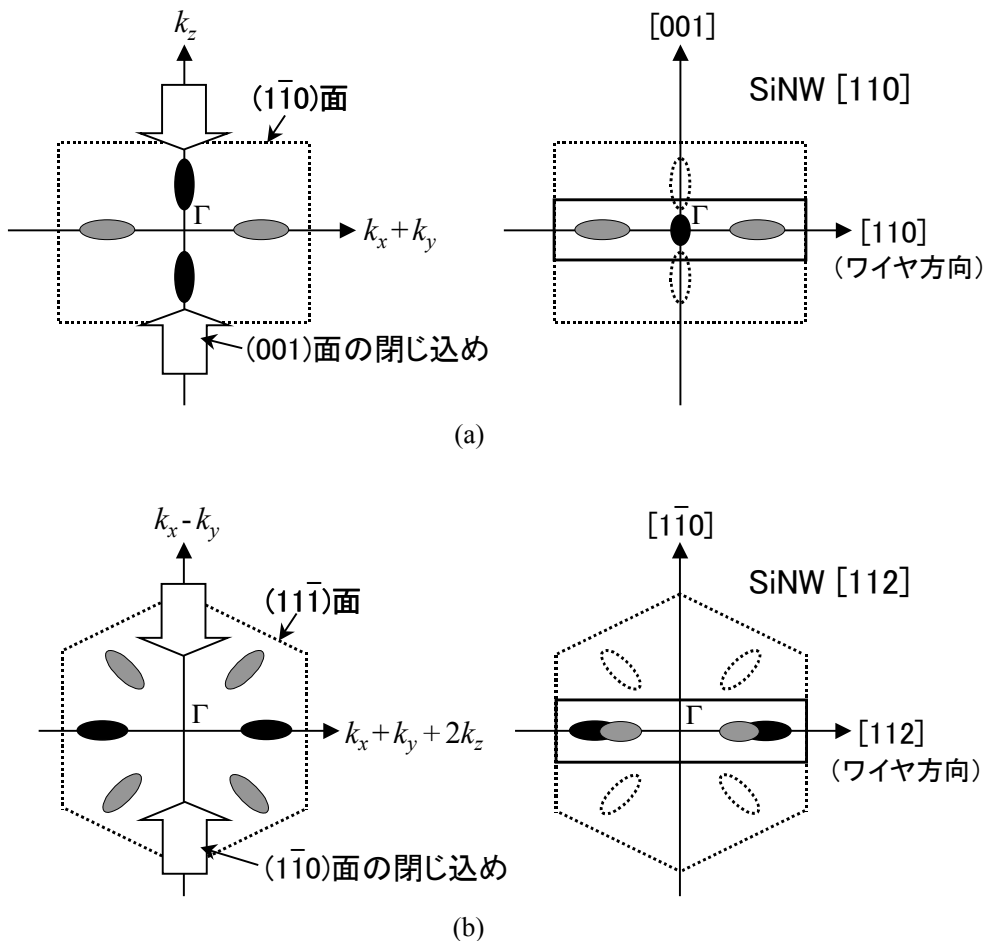


図 3.8 シリコンナノワイヤにおける伝導帯バンド構造の量子閉じ込め効果. (a)SiNW[110]、(b)SiNW[112].

予測することができる。しかし、その伝導帯下端と価電子帯上端の電子状態の詳細については、バルクのそれらとは異なる可能性がある。例えば有効質量を計算してみると、電子・正孔ともにバルクとは異なる値を示す。さらに有効質量は、ワイヤの断面形状にも依存する可能性が指摘されている。

実際に作製されている Fin 型 MOSFET の断面サイズは、今回の計算モデルよりも 1 桁以上大きい構造をしている。一方で、第一原理計算技術も進化を続けており、計算量を抑えることができる超ソフト擬ポテンシャルの提案や近年の計算機技術の進歩による速度の向上とメモリー増大により取り扱える原子数も増大している。また最近では、周期性を仮定せず局在する原子軌道の線形結合により分子軌道を表現する第一原理計算法が開発されており、これと非平衡グリーン関数法を結合させてナノ構造の第一原理量子輸送シミュレーションが可能になってきている。今後は、ゲート電極の効果や、室温で重要な役割を果たすキャリア散乱の影響を取り入れる試みがすすめられていくものと思われる。

## 参考文献

- [1] Takeshi Hara, Yoshihiro Yamada, Tadashi Maegawa, and Hideaki Tsuchiya, “Atomistic Study on Electronic Properties of Nanoscale SOI Channels,” *J. Physics: Conference Series* (Int’l Symp. on Advanced Nanodevices and Nanotechnology (ISANN2007), Hawaii, 2-7 Dec. 2007), Vol. 109, 012012, 2008.
- [2] Tadashi Maegawa, Tsuneki Yamauchi, Takeshi Hara, Hideaki Tsuchiya, and Matsuto Ogawa, “Strain Effects on Electronic Bandstructures in Nanoscaled Silicon: From Bulk to Nanowire,” *IEEE Trans. on Electron Devices*, Vol. 56, No. 4, pp. 553-559, Apr. 2009.
- [3] Hideaki Tsuchiya, Haruki Ando, Shun Sawamoto, Tadashi Maegawa, Takeshi Hara, Hironobu Yao, and Matsuto Ogawa, “Comparisons of Performance Potentials of Silicon Nanowire and Graphene Nanoribbon MOSFETs Considering First-Principles Bandstructure Effects,” *IEEE Trans. on Electron Devices*, Vol. 57, No. 2, pp. 406-414, Feb. 2010.

## 4章 ナノ構造の物理

### 4.1 ナノ構造の電子密度と電流密度

ナノ構造デバイスでは電子の波動性が顔を出し、トンネリング効果や量子閉じ込め効果などの量子力学的効果がデバイス特性を左右する。デバイス内には多数の電子が同時に運動を行っており、デバイス特性を厳密に解析するには多電子系のシュレディンガー方程式を解く必要があるが、固体中の全ての電子にシュレディンガー方程式を適用することは現実的に不可能であり、通常その必要はない。非常に多くの粒子からなる系に対しては統計的手法が有効であり、具体的には、反対称な波動関数をもつ系に適用されるフェルミ・ディラック分布(電子など)と、対称な波動関数をもつ系に適用されるボーズ・アインシュタイン分布(フォノン、光子など)がある。フォノンや光子では電子との相互作用により量子が放出されたり吸収されるため、全粒子数が一定でなくなる。この場合の分布関数は特にプランク分布とよばれている[1]。

- ・ フェルミ・ディラック分布関数

$$f_{FD}(E_k) = \frac{1}{e^{(E_k - E_f)/k_B T} + 1} \quad (4.1)$$

- ・ ボーズ・アインシュタイン分布関数(プランク分布関数)

$$f_{BE}(E_q) = \frac{1}{e^{E_q/k_B T} - 1} \quad (4.2)$$

本章では、ナノ構造中の電子の振舞いを特徴づける基本的物理量である電子密度と電流密度の表現について考えていく。

電子密度  $n(\mathbf{r}, t)$  は、確率密度  $|\varphi_k(\mathbf{r}, t)|^2$  にフェルミ・ディラック分布関数  $f_{FD}(E_k)$  を掛けて、すべての状態で和をとることで計算される。すなわち、

$$n(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} f_{FD}(E_k) |\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (4.3)$$

で定義される。ここで  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$  は 1 電子シュレディンガー方程式の解であり、多電子の情報はフェルミ・ディラック分布関数で取り入れられている。一方、電流密度  $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$  は 1 電子の確率流密度  $\mathbf{S}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$  にフェルミ・ディラック分布関数を掛けて、すべての状態で和をとることで計算される。すなわち、

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = e \sum_{\mathbf{k}} f_{FD}(E_k) \mathbf{S}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \frac{e\hbar}{m} \sum_{\mathbf{k}} f_{FD}(E_k) \text{Im}[\varphi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}, t) \nabla \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)] \quad (4.4)$$

で定義される。これらは  $\mathbf{k}$  空間の状態の和で表現されており、ナノ構造に適用する場合、 $\mathbf{k}$  空間の状態密度が必要になる。

#### $\mathbf{k}$ 空間の状態密度[1]

状態密度を求めるのに無限に大きな固体を考えると密度を出すことができないので、代わりに図 4.1 のような1辺の長さが  $L$  の立方体を想定し、それを周期的に配置することで無限に大きな固体を表現することにする。この場合、シュレディンガー方程式の一般解として

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(x, y, z) = A e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} \quad (k_x, k_y, k_z \text{ は正負の値を取る}) \quad (4.5)$$

と書くことができる。周期的境界条件  $\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r} + L)$  を与えると

$$\varphi(x + L, y, z) = \varphi(x, y + L, z) = \varphi(x, y, z + L) = \varphi(x, y, z) \quad (4.6)$$

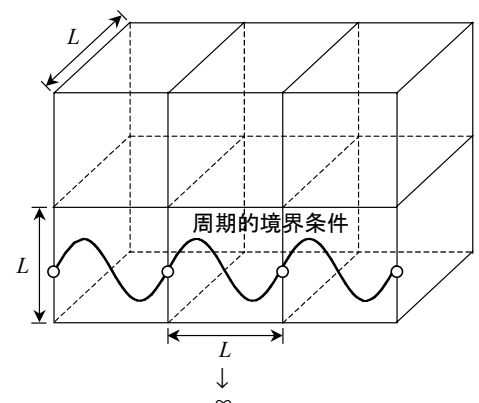


図 4.1 周期的境界条件.

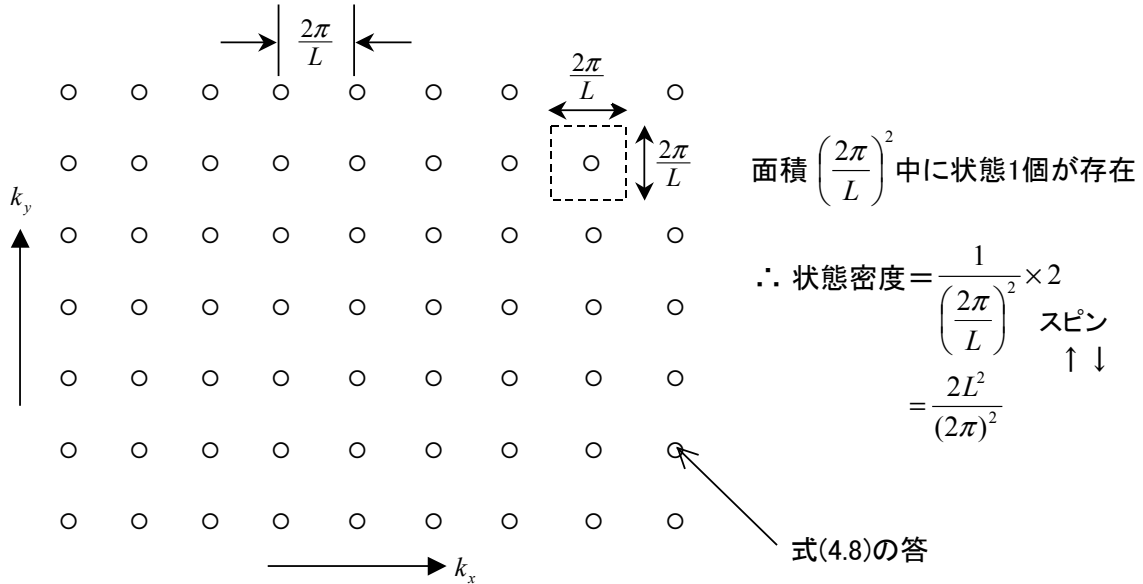


図 4.2  $\mathbf{k}$  空間の状態密度 (2次元の場合).

より

$$e^{ik_x L} = e^{ik_y L} = e^{ik_z L} = 1 \quad (4.7)$$

となるので、 $k_x, k_y, k_z$  は次の関係を満たさなければならない。

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L} n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L} n_z \quad (n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (4.8)$$

式(4.8)より、波数空間で状態  $\mathbf{k}$  の取り得る値は下図 4.2 の基盤目の交点になる(ここでは簡単のため 2次元で表示している)。1組の  $k_x, k_y, k_z$  によって1つの状態が指定されるから、小さい基盤目の1つずつがそれぞれ1つずつの状態に対応している。また電子は2種類のスピン( $\uparrow, \downarrow$ )を持つことが許されるため、このスピン縮重度 2 を考慮すると  $\mathbf{k}$  空間における状態密度は次のようになる。

$$\rho_{3D}(\mathbf{k}) = 2 \times \frac{1}{(2\pi/L)^3} = \frac{2L^3}{(2\pi)^3} \quad (4.9)$$

すなわち、立方体が無限に大きく波数が連続と考えられる場合には、状態の和は  $\mathbf{k}$  空間の状態密度  $\rho_{3D}(\mathbf{k})$  を用いて次の波数積分で表すことができる。

$$\sum_{\mathbf{k}} \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{3D}(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k} = \frac{2L^3}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d^3\mathbf{k} \quad (3 \text{次元}) \quad (4.10)$$

式(4.9)と(4.10)は3次元の場合であり、同様に考えていくと、2次元(量子井戸)と1次元(量子細線)の  $\mathbf{k}$  空間の状態密度は次のように与えられる。

$$\rho_{2D}(\mathbf{k}) = 2 \times \frac{1}{(2\pi/L)^2} = \frac{2L^2}{(2\pi)^2} \quad (4.11)$$

$$\rho_{1D}(\mathbf{k}) = 2 \times \frac{1}{2\pi/L} = \frac{2L}{2\pi} \quad (4.12)$$

さらに状態和は波数積分を用いて、それぞれ次のように表わされる。

$$\sum_{\mathbf{k}} \Rightarrow \sum_{n_x} \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{2D}(\mathbf{k}) d^2\mathbf{k}_t = \sum_{n_x} \frac{2L^2}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} d^2\mathbf{k}_t \quad (2 \text{次元}) \quad (4.13)$$

$$\sum_{\mathbf{k}} \Rightarrow \sum_{n_x} \sum_{n_y} \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{1D}(\mathbf{k}) dk_z = \sum_{n_x} \sum_{n_y} \frac{2L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \quad (1 \text{次元}) \quad (4.14)$$

式(4.10)、(4.13)、(4.14)を用いてナノ構造の電子密度を表現していく。簡単のため定常状態を考え、時間依存性は

無視する。

### 3次元電子密度(バルク)

3次元電子の場合、波動関数は次の平面波で与えられる。

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (4.15)$$

また電子のエネルギーは、等方性バンドを仮定して有効質量近似で

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \equiv E \quad (4.16)$$

と表わす。これらを式(4.3)に代入し、フェルミ・ディラック分布関数(4.1)と波数積分への変換式(4.10)を用いると

$$\begin{aligned} n_{3D}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}} f_{FD}(E_{\mathbf{k}}) |\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 \\ &= \frac{2L^3}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d^3\mathbf{k} f_{FD}(E_{\mathbf{k}}) \frac{1}{L^3} |e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|^2 \\ &= \frac{1}{4\pi^3} \int_{-\infty}^{\infty} d^3\mathbf{k} \frac{1}{\exp[(\hbar^2 k^2 / 2m - E_f) / k_B T] + 1} \\ &= \int_0^{\infty} dE \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} \frac{1}{\exp[(E - E_f) / k_B T] + 1} \end{aligned} \quad (4.17)$$

となる[1]。ここで上の最後の式 of 非積分関数に現れた以下の項を

$$\rho_{3D}(E) = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} \quad (4.18)$$

と表わし、これを3次元エネルギー状態密度とよぶ。3次元の場合、エネルギー状態密度はエネルギーに関して  $\sqrt{E}$  に比例し、有効質量に関して  $m^{3/2}$  に比例することが特徴である。

### 2次元電子密度(量子井戸): MOS反転層電子、量子井戸レーザなど

2次元電子の場合、 $z$ 方向を量子閉じ込め方向とすると、波動関数は次のように与えられる。

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L^2}} e^{i\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r}_t} \zeta_i(z) \quad (4.19)$$

すなわち  $z$  方向に閉じ込められた電子の波動関数を  $\zeta_i(z)$  と表わし、それに垂直な面内は自由電子の平面波で記述する。電子のエネルギーは、 $z$  方向の量子化エネルギーを  $E_i$  ( $i$ : サブバンド番号) として

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + E_i = \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m} + E_i \equiv E \quad (4.20)$$

と表わす。これらを式(4.3)に代入し、フェルミ・ディラック分布関数(4.1)と波数積分への変換式(4.13)を用いると

$$\begin{aligned} n_{2D}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}} f_{FD}(E_{\mathbf{k}}) |\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 \\ &= \sum_i \frac{2L^2}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} d^2\mathbf{k}_t f_{FD}(E_{\mathbf{k}}) \frac{1}{L^2} |e^{i\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r}_t}|^2 |\zeta_i(z)|^2 \\ &= \sum_i |\zeta_i(z)|^2 \frac{1}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} d^2\mathbf{k}_t \frac{1}{\exp[(\hbar^2 k_t^2 / 2m + E_i - E_f) / k_B T] + 1} \\ &= \sum_i |\zeta_i(z)|^2 \int_{E_i}^{\infty} dE \frac{m}{\pi \hbar^2} \frac{1}{\exp[(E - E_f) / k_B T] + 1} \end{aligned} \quad (4.21)$$

となる。ここで最後の式 of 非積分関数に現れた以下の項を



$$\rho_{2D}(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2} \quad (4.22)$$

と表わし、これを2次元エネルギー状態密度とよぶ。2次元の場合、エネルギー状態密度はエネルギーに依存せず一定の値をとり( $E^0$ に比例)、有効質量に関しては $m$ に比例することが特徴である。式(4.21)の最後の式は積分が実行でき、次式の表現を得ることができる。

$$n_{2D}(z) = \sum_i |\zeta_i(z)|^2 \frac{mk_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[ 1 + e^{(E_f - E_i)/k_B T} \right] \quad (4.23)$$

また2次元電子の問題では、閉じ込め方向の空間で積分した面電子密度(sheet electron density)が重要であり、式(4.23)から

$$n_s = \int dz n_{2D}(z) = \sum_i \underbrace{\int dz |\zeta_i(z)|^2}_{=1} \frac{mk_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[ 1 + e^{(E_f - E_i)/k_B T} \right] = \sum_i \frac{mk_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[ 1 + e^{(E_f - E_i)/k_B T} \right] \quad (4.24)$$

と表わされる。面電子密度の単位は $[\text{m}^{-2}]$ である。

### 1次元電子密度(量子細線): ナノワイヤ、量子細線レーザーなど

1次元電子の場合、 $y, z$ 方向を量子閉じ込め方向とすると、波動関数は次のように与えられる。

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_x x} \xi_i(y) \zeta_j(z) \quad (4.25)$$

すなわち $y$ および $z$ 方向に閉じ込められた電子の波動関数をそれぞれ $\xi_i(y)$ と $\zeta_j(z)$ と表わし、1次元自由方向の電子を平面波で記述する。電子のエネルギーは、 $y$ と $z$ 方向の量子化エネルギーを $E_i$ と $E_j$  ( $i, j$ : サブバンド番号)として

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + E_i + E_j \equiv E \quad (4.26)$$

と表わす。これらを式(4.3)に代入し、フェルミ・ディラック分布関数(4.1)と波数積分への変換式(4.14)を用いると

$$\begin{aligned} n_{1D}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}} f_{FD}(E_{\mathbf{k}}) |\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 \\ &= \sum_i \sum_j \frac{2L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x f_{FD}(E_{\mathbf{k}}) \frac{1}{L} |e^{ik_x x}|^2 |\xi_i(y)|^2 |\zeta_j(z)|^2 \\ &= \sum_i \sum_j |\xi_i(y)|^2 |\zeta_j(z)|^2 \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} dk_x \frac{1}{\exp[(\hbar^2 k_x^2 / 2m + E_i + E_j - E_f) / k_B T] + 1} \\ &= \sum_i \sum_j |\xi_i(y)|^2 |\zeta_j(z)|^2 \int_{E_i + E_j}^{\infty} dE \frac{\sqrt{2m}}{\pi \hbar} \frac{1}{\sqrt{E - E_i - E_j}} \frac{1}{\exp[(E - E_f) / k_B T] + 1} \end{aligned} \quad (4.27)$$

となる。ここで最後の式の非積分関数に現れた以下の項を

$$\rho_{1D}(E) = \frac{\sqrt{2m}}{\pi \hbar} \frac{1}{\sqrt{E - E_i - E_j}} \quad (4.28)$$

と表わし、これを1次元エネルギー状態密度とよぶ。1次元の場合、エネルギー状態密度はエネルギーに関して $1/\sqrt{E}$ に比例し、有効質量に関して $m^{1/2}$ に比例することが特徴である。 $y$ と $z$ 空間で積分した線電子密度(line electron density)は式(4.27)から

$$n_l = \int dz \int dy n_{1D}(\mathbf{r}) = \sum_i \sum_j \int_{E_i + E_j}^{\infty} dE \rho_{1D}(E) f_{FD}(E) \quad (4.29)$$

となる。線電子密度の単位は $[\text{m}^{-1}]$ である。

**[問題 4.1]** 式(4.17)、(4.21)、(4.27)を導出せよ。

## フェルミ・ディラック積分 (Fermi-Dirac integral)

2次元電子密度はエネルギー状態密度が一定であるためエネルギー積分が実行でき、式(4.23)のように簡単な表現を導くことができた。3次元電子密度と1次元電子密度は解析的に積分を行うことができないが、数値計算を簡単にするために、次のようなフェルミ・ディラック積分を用いた表現がよく用いられる。

$$\begin{aligned} n_{3D}(\mathbf{r}) &= \int_0^\infty dE \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} \frac{1}{\exp[(E - E_f)/k_B T] + 1} \\ &= \frac{(2mk_B T)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} F_{1/2}(x_f) \end{aligned} \quad (4.30)$$

$$\begin{aligned} n_{1D}(\mathbf{r}) &= \sum_i \sum_j |\xi_i(y)|^2 |\zeta_j(z)|^2 \int_{E_i + E_j}^\infty dE \frac{\sqrt{2m}}{\pi \hbar} \frac{1}{\sqrt{E - E_i - E_j}} \frac{1}{\exp[(E - E_f)/k_B T] + 1} \\ &= \sum_i \sum_j |\xi_i(y)|^2 |\zeta_j(z)|^2 \frac{\sqrt{2mk_B T}}{\pi \hbar} F_{-1/2}(x_f - x_i - x_j) \end{aligned} \quad (4.31)$$

ここで、

$$\begin{aligned} x_f &= E_f / k_B T \\ x_i &= E_i / k_B T \\ x_j &= E_j / k_B T \end{aligned} \quad (4.32)$$

を表し、フェルミ・ディラック積分の定義は、

$$F_j(t) = \int_0^\infty dx \frac{x^j}{1 + \exp(x-t)} \quad (4.33)$$

で与えられる。フェルミ・ディラック積分は次のような近似式で計算できることが知られている[2]。

$$F_j(t) \cong \left\{ \frac{d \cdot 2^d}{[b+t+(|t-b|^c + a^c)^{1/c}]^d} + \frac{e^{-t}}{\Gamma(d)} \right\}^{-1} \quad (4.34)$$

$$a = \left[ 1 + \frac{15}{4}(j+1) + \frac{1}{40}(j+1)^2 \right]^{1/2} \quad (4.35a)$$

$$b = 1.8 + 0.61j, \quad c = 2 + (2 - \sqrt{2}) \cdot 2^{-j}, \quad d = j+1 \quad (4.35b)$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}, \quad \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2}\sqrt{\pi} \quad (4.35c)$$

**[問題 4.2]** 式(4.30)と(4.31)を導出せよ。

## 閉じ込め次元とエネルギー状態密度

上で求めた3次元、2次元、1次元のエネルギー状態密度の概形を描くと図4.3のようになる。エネルギーが大きくなると高次の量子準位が現れてくるため、量子井戸では階段状に、量子細線ではノコギリ歯状の状態密度が形成されることになる。ナノ構造デバイスは、このような状態密度の特性を利用することでデバイス性能の向上や新機能の実現を目指している。図4.4はナノ構造デバイスを電子の自由度の次元で分類し整理したものである。電子の自由度を制限する量子閉じ込めを実現するためには、物理的に閉じ込め構造を形成するだけでなく、ポテンシャルによる電気

的な閉じ込め効果も利用されている。HEMT や MOSFET などのトランジスタは、もともとポテンシャルによる量子閉じ込め効果を利用して発展してきたデバイスである。図 4.4 に示されているナノ構造デバイスの分類とナノエレクトロニクスの発展については、「ナノエレクトロニクスの基礎」第 1 章に分かりやすくまとめられている。興味のある人は参考にすること。

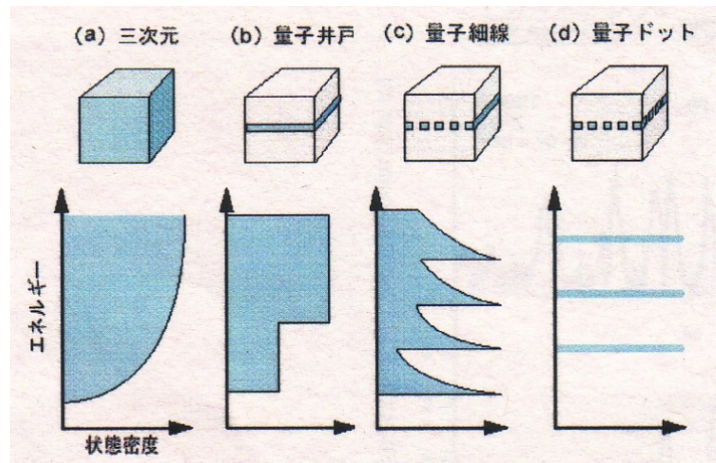
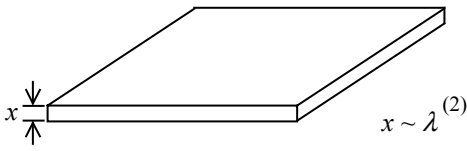
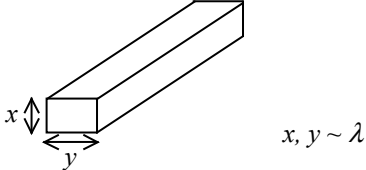
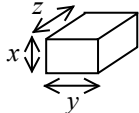


図 4.3 閉じ込め次元とエネルギー状態密度.

Classification	Confinement <sup>(1)</sup>	Examples
Quantum Well (2D)	 $x \sim \lambda$ <sup>(2)</sup>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• MOSFET, HEMT</li> <li>• Quantum Hall Effect <sup>(3)</sup></li> <li>• Resonant Tunneling</li> <li>• Quantum Well Laser</li> <li>• Graphene</li> </ul>
Quantum Wire (1D)	 $x, y \sim \lambda$	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Quantized Conductance <math>2e^2/h</math></li> <li>• Nano-wire</li> <li>• Quantum Wire Laser</li> <li>• Carbon Nanotube</li> </ul>
Quantum Box (0D)	 $x, y, z \sim \lambda$	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Single Electron Transistor</li> <li>• Quantum Dot Laser</li> <li>• Quantum Bit <sup>(4)</sup></li> <li>• C<sub>60</sub>-related Fullerene</li> </ul>

(1) physical confinement, potential confinement, (2) de Broglie wavelength ( $\lambda = h/\sqrt{2mE}$ )  $\approx 10$  nm, (3)  $h/e^2 = 25.813k\Omega$ , (4) Rabi oscillation of exciton

図 4.4 ナノ構造デバイスの分類.

### 有効質量とエネルギー状態密度

式(4.18)、(4.22)、(4.28)から分かるように、エネルギー状態密度はキャリアの有効質量  $m$  に依存する。具体的に述べると、エネルギー状態密度は  $m^{d/2}$  ( $d=3, 2, 1$ : 次元数) に比例する。したがって、有効質量の軽い材料はエネルギー状態密度が小さくなる。フォノンなどによる散乱確率は散乱後の状態密度に比例するため、有効質量の軽い材料では散乱確率が減りバリスティック伝導性が高まることが期待できる。一方で、状態密度が小さくなると電極からデバイスへ十分なキャリア数を供給する能力が低下する恐れが指摘されている(5.5.4)。さらに、有効質量の軽い材料を MOSFET のチャネルに用いた場合には、状態密度容量(量子キャパシタンス)の影響でゲート容量が低下し、電流駆動力の低下や低電圧化の障害になる可能性がある(5 章付録 C)。ナノ構造デバイスではバンド構造が重要な役割を果たすが、有効質量とキャリア速度(移動度)の関係だけでなく、有効質量と状態密度との関係も忘れてはいけない。

### 4.2 ツ・エサキの電流式 (Tsu-Esaki formula)

次に、ナノ構造を流れる電流について考える。式(4.4)で述べたように、多電子系の電流密度は次式で定義される。

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = e \sum_{\mathbf{k}} f_{FD}(E_{\mathbf{k}}) \mathbf{S}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e\hbar}{m} \sum_{\mathbf{k}} f_{FD}(E_{\mathbf{k}}) \text{Im}[\phi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \nabla \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})] \quad (4.4)$$

定常状態を考え、時間依存性は無視している。前節の電子密度と同様に上式を波数積分へ変換し、さらにナノ構造の波動関数を用いることによって、ナノ構造を流れる電流密度を計算するための具体的な表現を導き出すことができる。

まず図 4.5 に示すように、ポテンシャル障壁を 2 つの電極で挟んだ構造を考え、電極間に電圧  $V$  を印加したときに流れるトンネル電流密度の表現を求める。ここでは電極のフェルミエネルギーを  $E_f$  と表わすことにする。また両側の電極は 3 次元導体とする。第 1 章で議論したトンネル確率の計算と同様に、電子波が左方から振幅 1 で障壁に入射し、振幅  $r$  で反射され振幅  $t$  で透過すると考えて、それぞれの電子波の波動関数を図 4.5 中に記したように表現する。このときに左から右に流れる電流密度  $J_{12}$  を求める。この方向を  $x$  とする。電流密度は場所に関係なく一定となるので、どの位置で表現しても同じになるが(問題 4.4)、ここでは計算が簡単になる右側電極内で考える。右側電極での波動関数は

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} t(k_x) e^{ik_x x} e^{i\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r}_t} \quad (4.36)$$

となるので、これを式(4.4)に代入する。左から右へ流れる電流は  $k_x > 0$  の電子であるので

$$\begin{aligned} J_{12} &= \frac{e\hbar}{m} \sum_{\mathbf{k}_t} \sum_{k_x > 0} f_{FD}(E_{\mathbf{k}}) \text{Im} \left[ \varphi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \frac{\partial \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}{\partial x} \right] \\ &= \frac{e\hbar}{mL^3} \sum_{\mathbf{k}_t} \sum_{k_x > 0} f_{FD}(E_{\mathbf{k}}) \text{Im} \left[ t^*(k_x) e^{-ik_x x} e^{-i\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r}_t} \times ik_x t(k_x) e^{ik_x x} e^{i\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r}_t} \right] \\ &= \frac{e}{L^3} \sum_{\mathbf{k}_t} \sum_{k_x > 0} \frac{\hbar k_x}{m} T(E_{k_x}, V) f_{FD}(E_{\mathbf{k}}) \end{aligned} \quad (4.37)$$

となる。ここで確率密度のトンネル確率を

$$T(E_{k_x}, V) = |t(k_x)|^2 \quad (4.38)$$

とおいた。トンネル確率は電圧  $V$  に依存する。ここで、図 4.5 のように多数の電子が存在する 2 つの電極間を流れる電流を考える場合、厳密には右側電極でのパウリの排他律を考慮する必要があることに注意する。すなわち、右側のフェルミエネルギー以下のエネルギー領域にはすでに電子が存在しているため、たとえトンネル確率が有限であってもパウリの排他律が働きトンネリングが禁止される。これを考慮して式(4.37)の電流密度を波数積分で表すと

$$\begin{aligned} J_{12} &= \frac{e}{L^3} \sum_{\mathbf{k}_t} \sum_{k_x > 0} \frac{\hbar k_x}{m} T(E_{k_x}, V) f_{FD}^l(E_{\mathbf{k}}) [1 - f_{FD}^r(E_{\mathbf{k}} + eV)] \\ &= \frac{2e}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k}_t \int_0^{\infty} dk_x T(E_{k_x}, V) \frac{\hbar k_x}{m} f_{FD}^l(E_{\mathbf{k}}) [1 - f_{FD}^r(E_{\mathbf{k}} + eV)] \end{aligned} \quad (4.39)$$

となる。ここで  $f_{FD}^l(E_{\mathbf{k}})$  と  $f_{FD}^r(E_{\mathbf{k}} + eV)$  は、それぞれ左電極と右電極のフェルミ・ディラック分布関数を表す。一方、逆に右から左へ流れる電流密度  $J_{21}(k_x < 0)$  は同様に次のように求められる。

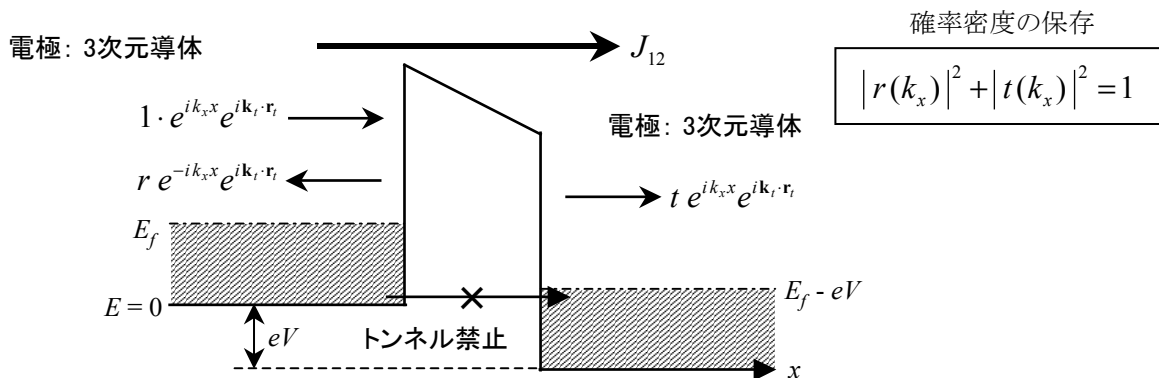


図 4.5 ポテンシャル障壁を流れるトンネル電流.  $E_f$  は電極のフェルミエネルギー、 $V$  は電極間にかけられた電圧を表す。

$$\begin{aligned}
J_{21} &= \frac{2e}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k}_t \int_{-\infty}^0 dk_x T(E_{k_x}, V) \frac{\hbar k_x}{m} f_{FD}^r(E_{\mathbf{k}} + eV) [1 - f_{FD}^l(E_{\mathbf{k}})] \\
&= -\frac{2e}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k}_t \int_0^{\infty} dk_x T(E_{k_x}, V) \frac{\hbar k_x}{m} f_{FD}^r(E_{\mathbf{k}} + eV) [1 - f_{FD}^l(E_{\mathbf{k}})]
\end{aligned} \tag{4.40}$$

ここで  $f_{FD}(E_{-\mathbf{k}}) = f_{FD}(E_{\mathbf{k}})$  の関係を使った。正味の電流密度は  $J_{12}$  と  $J_{21}$  の合計で与えられるので、式(4.39)と(4.40)より

$$J = J_{12} + J_{21} = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k}_t \int_0^{\infty} dk_x T(E_{k_x}, V) \frac{\hbar k_x}{m} [f_{FD}^l(E_{\mathbf{k}}) - f_{FD}^r(E_{\mathbf{k}} + eV)] \tag{4.41}$$

となる。上式をさらにエネルギー積分に変換する。有効質量近似を用いて

$$E_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m}, \quad E_t = \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m}, \quad E = E_x + E_t$$

と表すと

$$J = \frac{em}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} dE_x \int_0^{\infty} dE_t T(E_x, V) [f_{FD}^l(E) - f_{FD}^r(E + eV)] \tag{4.42}$$

となり、さらに横方向エネルギー  $E_t$  の積分を実行すると

$$J = \frac{emk_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} dE_x T(E_x, V) \ln \left[ \frac{1 + e^{(E_f - E_x)/k_B T}}{1 + e^{(E_f - E_x - eV)/k_B T}} \right] \tag{4.43}$$

が得られる。上式をツ・エサキの電流式(Tsu-Esaki formula)とよぶ[3]。透過確率  $T(E_x, V)$  は 1.2 節で述べたトランスファー・マトリックス法などで求め、それを用いて式(4.43)を計算することでトンネル障壁の電流-電圧特性を解析することができる。ツ・エサキは、実際に式(4.43)を用いて、共鳴トンネルダイオードの提案を行った[3]。

**[問題 4.3]** 式(4.42)-(4.43)を導出せよ。

**[問題 4.4]** 図 4.5 の左側電極内の波動関数を用いて  $J_{12}$  を表現し、式(4.37)と同じ電流密度の式が得られることを確認せよ。左側電極内の波動関数は、振幅反射率  $r$  を用いて次式で表わされる。

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \left[ e^{ik_x x} + r(k_x) e^{-ik_x x} \right] e^{ik_y y} \tag{4.44}$$

また図 4.5 中に記した確率密度の保存の関係を用いること。

### 4.3 ランダウアー・ビュティカーの式 (Landauer-Büttiker formula)

次に量子細線を通る電流密度を表現してみる。図 4.6 に電圧を印加した量子細線の解析モデルを示す。両側の電極も 1 次元導体と仮定している。振幅透過確率を  $t_{i'j' \rightarrow ij}$  と表したとき、右側電極での波動関数は

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} t_{i'j' \rightarrow ij}(k_x) e^{ik_x x} \xi_i(y) \zeta_j(z) \tag{4.45}$$

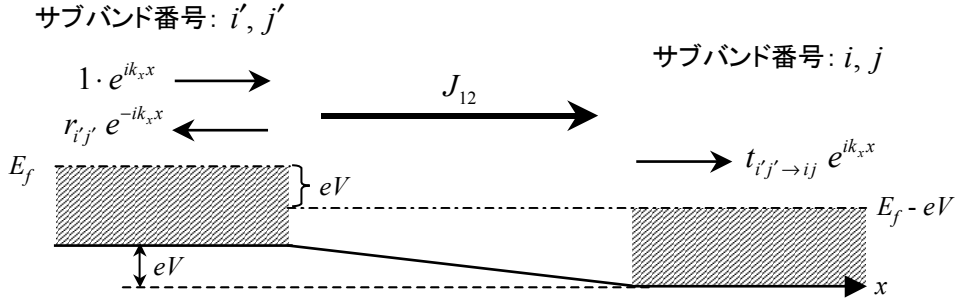


図 4.6 両側の電極も 1 次元導体とする. 左電極のサブバンド番号を  $i', j'$ 、右電極のそれを  $i, j$  とする.

となる。これを式(4.4)に代入すると、左から右へ流れる電流 ( $k_x > 0$ ) の式は

$$\begin{aligned}
J_{12}(y, z) &= \frac{e\hbar}{mL} \sum_i \sum_j |\xi_i(y)|^2 |\zeta_j(z)|^2 \sum_{k_x > 0} f_{FD}^{i'j'}(E_k) [1 - f_{FD}^{ij}(E_k + eV)] \\
&\quad \times \text{Im} [t_{i'j' \rightarrow ij}^*(k_x) e^{-ik_x x} \times ik_x t_{i'j' \rightarrow ij}(k_x) e^{ik_x x}] \\
&= \frac{e}{L} \sum_i \sum_j |\xi_i(y)|^2 |\zeta_j(z)|^2 \sum_{k_x > 0} \frac{\hbar k_x}{m} T_{i'j' \rightarrow ij}(E_{k_x}, V) f_{FD}^{i'j'}(E_k) [1 - f_{FD}^{ij}(E_k + eV)] \\
&= \frac{2e}{2\pi} \sum_i \sum_j |\xi_i(y)|^2 |\zeta_j(z)|^2 \int_0^\infty dk_x \frac{\hbar k_x}{m} T_{i'j' \rightarrow ij}(E_{k_x}, V) f_{FD}^{i'j'}(E_k) [1 - f_{FD}^{ij}(E_k + eV)] \\
&= \frac{2e}{h} \sum_i \sum_j |\xi_i(y)|^2 |\zeta_j(z)|^2 \int_0^\infty dE_x T_{i'j' \rightarrow ij}(E_x, V) f_{FD}^{i'j'}(E) [1 - f_{FD}^{ij}(E + eV)]
\end{aligned} \tag{4.46}$$

となる。したがって、正味の電流密度は

$$\begin{aligned}
J(y, z) &= J_{12}(y, z) + J_{21}(y, z) \\
&= \frac{2e}{h} \sum_i \sum_j |\xi_i(y)|^2 |\zeta_j(z)|^2 \int_0^\infty dE_x T_{i'j' \rightarrow ij}(E_x, V) [f_{FD}^{i'j'}(E) - f_{FD}^{ij}(E + eV)]
\end{aligned} \tag{4.47}$$

となる。ここで、フェルミ・ディラック分布関数内のエネルギー  $E$  は全エネルギー ( $E = E_x + E_i + E_j$ ) である。これより、量子細線を通る全電流は、式(4.47)を断面内で積分し

$$I = \int dz \int dy J(y, z) = \frac{2e}{h} \sum_i \sum_j \int_0^\infty dE_x T_{i'j' \rightarrow ij}(E_x, V) [f_{FD}^{i'j'}(E) - f_{FD}^{ij}(E + eV)] \tag{4.48}$$

と表わされる。これをランダウアー・ビュティカーの式(Landauer-Büttiker formula)とよぶ[4,5]。

ここで、 $T \approx 0K$  で  $eV \ll E_f$  の場合を考える。このとき

$$\begin{aligned}
I &\cong \frac{2e}{h} \sum_i \sum_j \left[ \int_0^{E_f - E_i - E_j} dE_x T_{i'j' \rightarrow ij}(E_x, V) - \int_0^{E_f - E_i - E_j - eV} dE_x T_{i'j' \rightarrow ij}(E_x, V) \right] \\
&\cong \frac{2e}{h} \sum_i \sum_j T_{i'j' \rightarrow ij}(E_f - E_i - E_j, V = 0) \underbrace{\left[ \int_0^{E_f - E_i - E_j} dE_x - \int_0^{E_f - E_i - E_j - eV} dE_x \right]}_{= eV} \\
&= V \frac{2e^2}{h} \sum_i \sum_j T_{i'j' \rightarrow ij}(E_f - E_i - E_j, V = 0) = eV
\end{aligned} \tag{4.49}$$

となり、これより量子細線のコンダクタンス  $G$  が次式で与えられることがわかる。

$$G = \frac{I}{V} = \frac{2e^2}{h} \sum_i \sum_j T_{i'j' \rightarrow ij}(E_f - E_i - E_j, V = 0) \tag{4.50}$$

これをランダウアー公式(Landauer formula)とよぶ。量子細線内に障壁や散乱が全くない完全導体 ( $T_{i'j' \rightarrow ij} = \delta_{i'j', ij}$ ) の場合には、式(4.50)は次のような簡単な式になる。

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_i \sum_j 1 = \frac{2e^2}{h} N \tag{4.51}$$

ここで  $N$  は伝搬モードの数を表す。すなわち量子細線内を伝わる電子波のモード数の増加とともに、コンダクタンスが階段状に増加する現象が現れる。これは実験的にも観測されており、量子化コンダクタンス(quantized conductance)とよばれている[6,7]。階段のステップの高さは  $2e^2/h$  と基礎物理定数のみで与えられることから、材料によらない普遍的な値を示すことになる。しかし実際には問題 4.5 で取り上げるように、バンド構造に縮退がある場合には、 $2e^2/h$  の整数倍の値を取ることがある。 $2e^2/h = 7.746 \times 10^{-5} \text{S}$  であり、その逆数( $h/2e^2 = 12.91 \text{k}\Omega$ )は量子抵抗(quantum resistance)とよばれる。

[問題 4.5] 第 2 章で学んだように、Si の伝導帯最下端のバンド構造は X 点付近に 6 つの等価な回転楕円体形状の等エネルギー面を持っている(図 2.15(b)参照)。このことを考慮して、図 4.7 に示す正方形断面をもつ Si 量子細線([100]方向)の量子化コンダクタンスの値(第一ステップ)を求めなさい。必ずその理由を述べること。

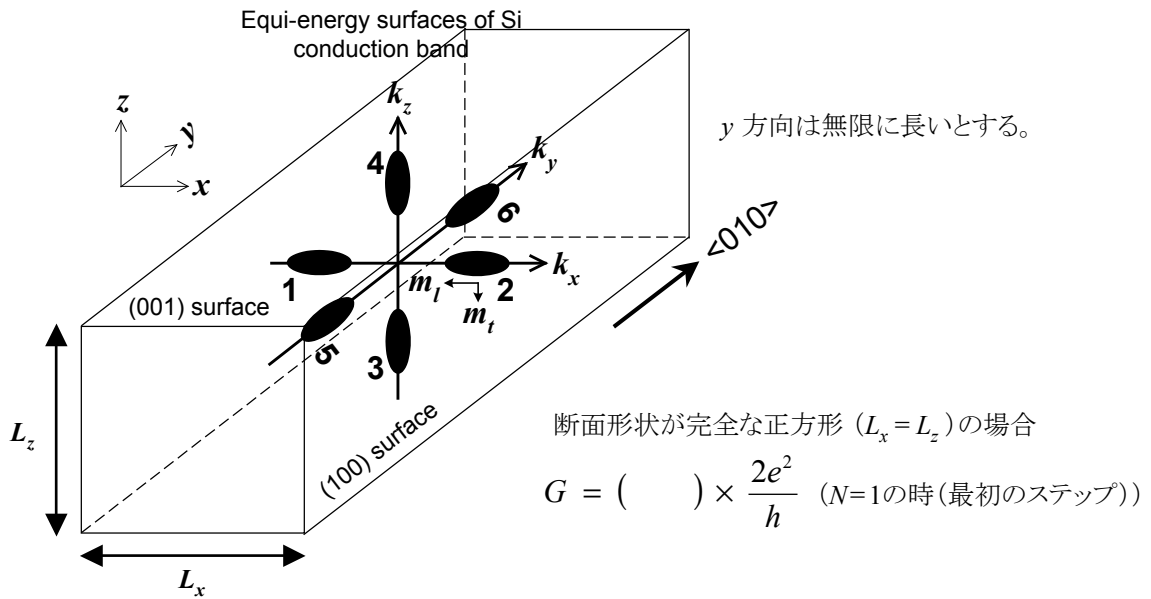


図 4.7 正方形断面をもつ[100]方向 Si 量子細線の模式図。

#### 4.4 バリスティック MOSFET の名取モデル (Natori formula)

シリコン MOSFET の微細化によりトランジスタのゲート長が縮小され、キャリアの平均自由行程(電子:数 nm~数十 nm)よりも短くなると、ソースから注入されたキャリアがチャンネル内で一度も散乱されずにドレインに到達するバリスティック輸送(ballistic transport)が起こると考えられている。バリスティック輸送が顕在化すると、MOSFET の電流駆動力(ドレイン飽和電流)が増大すると期待されるため、その実現に向けた研究が進められている(詳細は 5 章で)。本節では、全てのキャリアがソースからドレインまでバリスティックに通過する時のドレイン電流の式を、名取モデルに従って導出してみる[8,9]。

図 4.8 に示す SOI (Silicon-On-Insulator)構造 MOSFET に対して、チャンネル方向を  $x$ 、ゲート-基板方向を  $z$ 、チャンネルの奥行き方向を  $y$  とする。SOI 構造では不純物を含まない真性チャンネルが利用できるため、バリスティック MOSFET の実現に有効な構造と考えられている。ゲートとドレインに電圧を印加したオン状態では、各方向のポテンシャル分布は、模式的に図 4.9 のように描かれる。ここで、 $E_z^{ch}$  はチャンネル内 2 次元電子ガスの  $z$  方向の量子準位エネルギーを表す。この  $E_z^{ch}$  はドレインに電圧を加

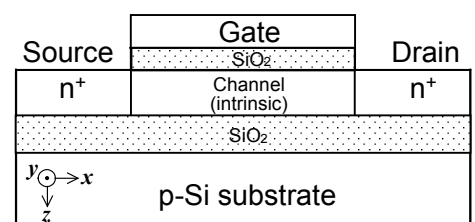


図 4.8 MOSFET の構造。

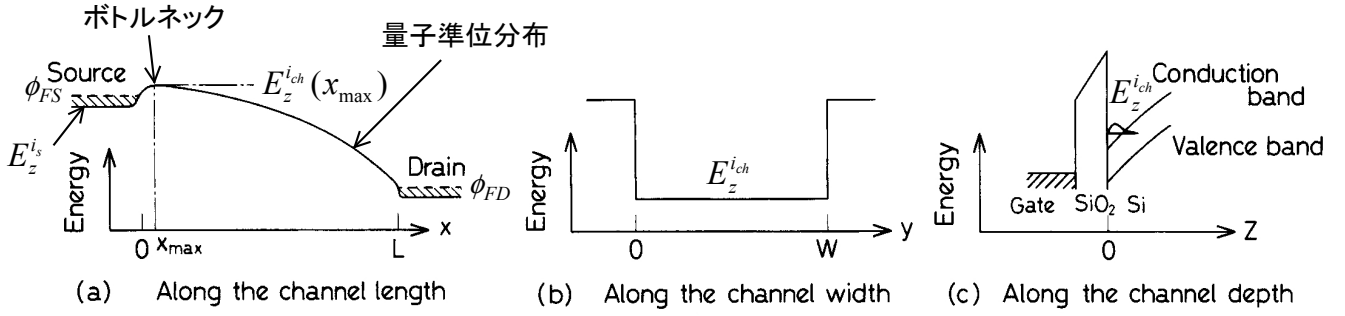


図 4.9 MOSFET 内のポテンシャル分布.

えた場合は、図 4.9(a)のようにソースからドレインに向かって変化するようになる。このときチャンネルとソースの接合付近に形成されるポテンシャルの最大点を**ボトルネック(bottleneck)**と呼んでいる。後で述べるようにバリスティックMOSFETでは、ゲート電圧によってボトルネックの高さを調節することで、ソースからドレインに流れる電流が制御されるためそう呼ばれる。

今、チャンネルの奥行き方向の長さ  $W$  は十分大きく、電子の波数  $k_y$  は連続的であるとす。また、ソース内とドレイン内の量子準位サブバンド指標をそれぞれ  $i_s, i_d$  とすると、ドレイン内の波動関数は次式のように表すことができる。

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L^2}} t_{i_s \rightarrow i_d}(k_x) e^{ik_x x} e^{ik_y y} \zeta_{i_d}(z) \quad (4.52)$$

このときにソースからドレインへ流れる電流密度  $J_{12}$  は、波動関数(4.52)を多電子系の電流密度の定義式(4.4)に代入すると、次のように書くことができる。

$$\begin{aligned} J_{12}(z) &= \frac{e\hbar}{m_x L^2} \sum_{i_d} |\zeta_{i_d}(z)|^2 \sum_{k_y} \sum_{k_x > 0} f_{FD}^{i_s}(E_{\mathbf{k}}) [1 - f_{FD}^{i_d}(E_{\mathbf{k}} + eV_D)] \\ &\quad \times \text{Im} \left[ t_{i_s \rightarrow i_d}^*(k_x) e^{-ik_x x} e^{-ik_y y} \times ik_x t_{i_s \rightarrow i_d}(k_x) e^{ik_x x} e^{ik_y y} \right] \\ &= \frac{e}{L^2} \sum_{i_d} |\zeta_{i_d}(z)|^2 \sum_{k_y} \sum_{k_x > 0} \frac{\hbar k_x}{m_x} T_{i_s \rightarrow i_d}(E_{k_x}, V_D, V_G) f_{FD}^{i_s}(E_{\mathbf{k}}) [1 - f_{FD}^{i_d}(E_{\mathbf{k}} + eV_D)] \\ &= \frac{2e}{(2\pi)^2} \sum_{i_d} |\zeta_{i_d}(z)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_0^{\infty} dk_x \frac{\hbar k_x}{m_x} T_{i_s \rightarrow i_d}(E_{k_x}, V_D, V_G) f_{FD}^{i_s}(E_{\mathbf{k}}) [1 - f_{FD}^{i_d}(E_{\mathbf{k}} + eV_D)] \end{aligned} \quad (4.53)$$

ここで、 $V_D$  はドレイン電圧、 $V_G$  はゲート電圧を表す。図 4.9(a)のポテンシャル変化が断熱的であり、2次元電子ガスのサブバンド間遷移が起こらないと仮定すると( $i_d = i_s$ )、式(4.53)のサブバンド和はソース内の量子準位サブバンド指標  $i_s$  の和で表すことができ

$$J_{12}(z) = \frac{2e}{(2\pi)^2} \sum_{i_s} |\zeta_{i_s}(z)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_0^{\infty} dk_x \frac{\hbar k_x}{m_x} T_{i_s}(E_{k_x}, V_D, V_G) f_{FD}^{i_s}(E_{\mathbf{k}}) [1 - f_{FD}^{i_s}(E_{\mathbf{k}} + eV_D)] \quad (4.54)$$

とすることができる。ここで  $T_{i_s \rightarrow i_d} = T_{i_s}$  とした。したがって、正味のドレイン電流密度は次のように表されることになる。

$$\begin{aligned} J(z) &= J_{12}(z) + J_{21}(z) \\ &= \frac{2e}{(2\pi)^2} \sum_{i_s} |\zeta_{i_s}(z)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_0^{\infty} dk_x \frac{\hbar k_x}{m_x} T_{i_s}(E_{k_x}, V_D, V_G) [f_{FD}^{i_s}(E_{\mathbf{k}}) - f_{FD}^{i_s}(E_{\mathbf{k}} + eV_D)] \end{aligned} \quad (4.55)$$

MOSFET を流れる全ドレイン電流  $I_D$  は、式(4.55)をゲート-基板方向( $z$  方向)に積分して

$$I_D = \int J(z) dz = \frac{2e}{(2\pi)^2} \sum_{i_s} \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_0^{\infty} dk_x \frac{\hbar k_x}{m_x} T_{i_s}(E_{k_x}, V_D, V_G) [f_{FD}^{i_s}(E_{\mathbf{k}}) - f_{FD}^{i_s}(E_{\mathbf{k}} + eV_D)] \quad (4.56)$$

となる。

次に、式(4.56)をエネルギー積分に変換する。フェルミ・ディラック分布関数に含まれる電子の全エネルギーは



$$E_{\mathbf{k}} = E_x + E_y + E_z^i = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} + E_z^i \quad (4.57)$$

であるので、

$$E_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x}, \quad E_y = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} \quad \text{および} \quad dE_x = \frac{\hbar^2 k_x}{m_x} dk_x, \quad dE_y = \frac{\hbar^2 k_y}{m_y} dk_y$$

を式(4.56)に用いると

$$I_D = \frac{e}{\pi^2 \hbar^2} \sum_{i_s} \sqrt{\frac{m_y}{2}} \int_0^\infty dE_y \int_0^\infty dE_x \frac{1}{\sqrt{E_y}} T_{i_s}(E_x, V_D, V_G) [f_{FD}^{i_s}(\phi_{FS}, E) - f_{FD}^{i_s}(\phi_{FS} - eV_D, E)] \quad (4.58)$$

となる。ここで、 $m_x$ と $m_y$ はそれぞれ $x$ 方向と $y$ 方向の有効質量を表し、シリコン伝導帯の異方性を考慮している。また、 $\phi_{FS}$ はソースのフェルミエネルギーを表し、この $\phi_{FS}$ を用いると、ソースおよびドレインのフェルミ・ディラック分布関数はそれぞれ

$$f_{FD}^{i_s}(\phi_{FS}, E) = \frac{1}{\exp[(E_x + E_y + E_z^i - \phi_{FS})/k_B T] + 1} \quad (4.59)$$

$$f_{FD}^{i_s}(\phi_{FS} - eV_D, E) = \frac{1}{\exp[(E_x + E_y + E_z^i - \phi_{FS} + eV_D)/k_B T] + 1} \quad (4.60)$$

と与えられる。

ここまではソース内の電子状態から電流を求めているが、実は、バリスティック MOSFET の本質を理解するには、上記の定式化は役に立たない。MOSFET の特徴はゲート電極による電流制御にあるが、ソース内の電子分布は理想的な状況下ではゲート電圧に依存しないからである。そこで名取は、図 4.9(a)の  $x = x_{\max}$  の位置、すなわちボトルネック点で電流を表現することを考えた[8,9]。そこではソース内のキャリアはほぼ熱平衡状態にあると考えて、ボトルネック点では正の速度(ソースからドレイン方向)を持つ熱平衡状態の電子がチャネルに向かって注入されると仮定する。したがってボトルネック点は、バーチャルソース (virtual source) とも呼ばれている。ボトルネック点のエネルギー高さは、ゲート酸化膜を介した容量結合によってゲート電圧で制御されるため、その電子密度はゲート電圧で変化する。このボトルネック点の電子密度とドレイン電流から、チャネルへの注入速度  $v_{inj}$  (injection velocity) という概念が生まれた。では次に、そのボトルネック点での電流の表現を求めることにする。

今、チャネル内のポテンシャル変化は十分に滑らかで電子波の反射は無視でき、さらに散乱がないことを考えると、式(4.58)の透過確率は図 4.10 のように与えることができる。これを式で表すと次のようになる。

$$T_{i_s}(E_x, V) = 1, \quad E_x + E_z^i \geq E_z^{ich}(x_{\max}) \\ = 0, \quad \text{otherwise} \quad (4.61)$$

式(4.61)を式(4.58)に代入すると、

$$I_D = \frac{e}{\pi^2 \hbar^2} \sum_{i_s} \sqrt{\frac{m_y}{2}} \int_0^\infty dE_y \int_{E_z^{ich}(x_{\max}) - E_z^i}^\infty dE_x \frac{1}{\sqrt{E_y}} [f_{FD}^{i_s}(\phi_{FS}, E) - f_{FD}^{i_s}(\phi_{FS} - eV_D, E)] \\ = \frac{e}{\pi^2 \hbar^2} \sum_{i_{ch}} \sqrt{\frac{m_y}{2}} \int_0^\infty dE_y \int_0^\infty dE_x \frac{1}{\sqrt{E_y}} [f_{FD}^{i_{ch}}(\phi_{FS}, E) - f_{FD}^{i_{ch}}(\phi_{FS} - eV_D, E)] \quad (4.62)$$

となる。ここで上式の第 2 式ではボトルネック点のサブバンド指標  $i_{ch}$  で電流が表されており、特に、被積分関数のフェルミ・ディラック分布関数は次式のように、ボトルネック点の量子準位サブバンドエネルギー  $E_z^{ich}(x_{\max})$  で記述されてい

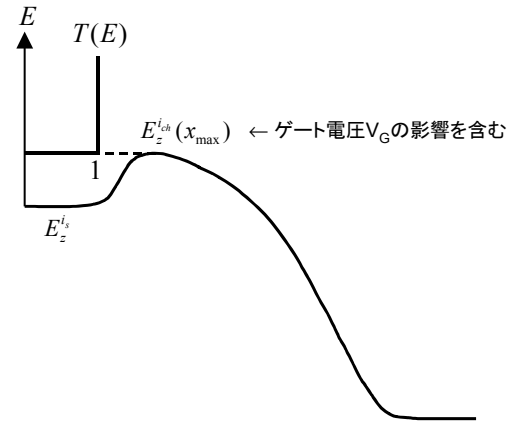


図 4.10 透過確率.

る。

$$f_{FD}^{ich}(\phi_{FS}, E) = \frac{1}{\exp[(E_x + E_y + E_z^{ich}(x_{\max})(V_G) - \phi_{FS})/k_B T] + 1} \quad (4.63)$$

$$f_{FD}^{ich}(\phi_{FS} - eV_D, E) = \frac{1}{\exp[(E_x + E_y + E_z^{ich}(x_{\max})(V_G) - \phi_{FS} + eV_D)/k_B T] + 1} \quad (4.64)$$

このように名取モデルでは、ボトルネック点においてもフェルミ・ディラック分布関数(熱平衡状態)が成り立つと仮定している。さらに透過確率が1であることから、散乱等によってキャリアがチャンネル内からソースに戻ることはないため、結局、ボトルネック点の運動量分布関数は、チャンネル方向の速度成分のみを持つ完全半形型のフェルミ・ディラック分布関数(hemi-Fermi-Dirac distribution function)を仮定していることになる。この仮定はほぼ正しいことが、モンテカルロ計算による解析により確かめられている[10]。そして式(4.62)のエネルギー積分を実行し結果を整理すると、バリスティック MOSFET のドレイン電流は次式で与えられる(導出は付録を参照のこと)。

$$I_D = \frac{\sqrt{2}e(k_B T)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^2} \sum_{i_{ch}} \sqrt{m_y} \left[ F_{1/2} \left( \frac{\phi_{FS} - E_z^{ich}(x_{\max})(V_G)}{k_B T} \right) - F_{1/2} \left( \frac{\phi_{FS} - eV_D - E_z^{ich}(x_{\max})(V_G)}{k_B T} \right) \right] \quad (4.65)$$

ここで  $F_{1/2}$  は式(4.33)で定義されるフェルミ・ディラック積分である。

$$F_j(t) = \int_0^\infty dx \frac{x^j}{1 + \exp(x-t)} \quad (4.33)$$

一方、ボトルネック点における面電荷密度  $Q$  は式(4.63)と(4.64)から求めることができ、次式で与えられる(導出は付録を参照のこと)。

$$\begin{aligned} Q &= 2e \sum_{i_{ch}} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^\infty dk_y \int_0^\infty dk_x f_{FD}^{ich}(\phi_{FS}, k_x, k_y) + 2e \sum_{i_{ch}} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^\infty dk_y \int_{-\infty}^0 dk_x f_{FD}^{ich}(\phi_{FS} - qV_D, k_x, k_y) \\ &= \frac{e k_B T}{2\pi \hbar^2} \sum_{i_{ch}} \sqrt{m_x m_y} \ln \left\{ \left[ 1 + \exp \left( \frac{\phi_{FS} - E_z^{ich}(x_{\max})(V_G)}{k_B T} \right) \right] \times \left[ 1 + \exp \left( \frac{\phi_{FS} - qV_D - E_z^{ich}(x_{\max})(V_G)}{k_B T} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.66)$$

したがって、注入速度  $v_{inj}$  は式(4.65)と(4.66)を計算することにより、次式で求めることができる。

$$I_D = Q v_{inj} \quad (4.67)$$

絶縁膜厚・しきい値・ゲート電圧一定の下では誘起電荷量は一定であるので、高電流駆動力化の本質は、あくまでソース端での高いキャリア速度である。名取モデルは、バリスティック極限でのソース端キャリア速度(注入速度)およびドレイン電流値を与えるものであり、デバイス性能の観点からは微細化の到達点を示す有用な理論モデルである(関連内容 5.4.4 バリスティック輸送)。なお、ドレイン電圧  $V_D$  が十分に大きい場合、式(4.65)と(4.66)の右辺第2項は無視できる。

**[問題 4.6]** 式(4.65)、(4.66)及び式(4.67)を用いて、ドレイン電圧  $V_D$  が十分に大きい場合のドレイン飽和電流と注入速度の  $N_s^{\text{source}}$  ( $Q = eN_s^{\text{source}}$ ) 依存性を計算しグラフにせよ。温度依存性についても検討せよ。

## 参考文献

- [1] 土屋 英昭、「数理物理工学」テキスト。
- [2] X. Aymerich-Humet, F. Serra-Mestres, J. Millán, *J. Appl. Phys.*, **54** (5), 2850 (1983).
- [3] R. Tsu and L. Esaki, “Tunneling in a finite superlattice,” *Appl. Phys. Lett.*, **22** (11), 562 (1973).
- [4] R. Laudauer, “Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction,” *IBM J. Res. Develop.*, **1**, 223 (1957).
- [5] M. Büttiker, “Symmetry of electrical conduction,” *IBM J. Res. Develop.*, **32** (3), 317 (1988).

- [6] B. J. van Wees, L. P. Kouwenhoven, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. E. Mooij, C. T. Foxon, and J. J. Harris, "Quantized conductance of magnetoelectric subbands in ballistic point contacts," *Phys. Rev. B*, **38** (5), 3625 (1988).
- [7] D. A. Wharam, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J. E. F. Frost, D. G. Hasko, D. C. Peacock, D. A. Ritchie, and G. A. C. Jones, "One-dimensional transport and the quantisation of the ballistic resistance," *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **21**, L209 (1988).
- [8] K. Natori, "Ballistic Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor," *J. Appl. Phys.*, vol. 76, no. 8, pp. 4879-4890, 1994.
- [9] K. Natori, "Scaling Limit of the MOS transistor –A Ballistic MOSFET-," *IEICE Trans. Electron.*, vol. E84-C, no. 8, pp. 1029-1036, 2001.
- [10] H. Tsuchiya, K. Fujii, T. Mori, and T. Miyoshi, "A Quantum-Corrected Monte Carlo Study on Quasi-Ballistic Transport in Nanoscale MOSFETs," *IEEE Trans. on Electron Devices*, vol. 53, no. 12, pp. 2965-2971, 2006.

付録 1: 式(4.65)の導出

式(4.62)のエネルギー積分は以下のように計算することができる。

$$\begin{aligned}
 I_0 &= \int_0^\infty dE_y \int_0^\infty dE_x \frac{1}{\sqrt{E_y}} [f_{FD}^{i_{ch}}(\phi_{FS}, E) - f_{FD}^{i_{ch}}(\phi_{FS} - eV_D, E)] \\
 &= \int_0^\infty dE_y \frac{1}{\sqrt{E_y}} \int_0^\infty dE_x \left\{ \frac{1}{\exp[(E_x + E_y + E_z^{i_{ch}}(x_{\max}) - \phi_{FS})/k_B T] + 1} - \dots \right\} \\
 &= \int_0^\infty dE_y \frac{1}{\sqrt{E_y}} \int_0^\infty dE_x \left\{ \frac{\exp[-(E_x + E_y + E_z^{i_{ch}}(x_{\max}) - \phi_{FS})/k_B T]}{\exp[-(E_x + E_y + E_z^{i_{ch}}(x_{\max}) - \phi_{FS})/k_B T] + 1} - \dots \right\} \\
 &= \int_0^\infty dE_y \frac{1}{\sqrt{E_y}} \left( -k_B T \left[ \ln \left\{ \exp[-(E_x + E_y + E_z^{i_{ch}}(x_{\max}) - \phi_{FS})/k_B T] + 1 \right\} \right]_0^\infty + \dots \right) \\
 &= \int_0^\infty dE_y \frac{1}{\sqrt{E_y}} \left[ k_B T \ln \left\{ \exp[-(E_y + E_z^{i_{ch}}(x_{\max}) - \phi_{FS})/k_B T] + 1 \right\} - \dots \right] \\
 &= k_B T \int_0^\infty dE_y \left( 2\sqrt{E_y} \right)' \left[ \ln \left\{ \exp[-(E_y + E_z^{i_{ch}}(x_{\max}) - \phi_{FS})/k_B T] + 1 \right\} - \dots \right] \\
 &= k_B T \left( \left[ 2\sqrt{E_y} \ln \left\{ \exp[-(E_y + E_z^{i_{ch}}(x_{\max}) - \phi_{FS})/k_B T] + 1 \right\} \right]_0^\infty - \int_0^\infty dE_y \frac{2\sqrt{E_y}}{-k_B T} \frac{\exp[-(E_y + E_z^{i_{ch}}(x_{\max}) - \phi_{FS})/k_B T]}{\exp[-(E_y + E_z^{i_{ch}}(x_{\max}) - \phi_{FS})/k_B T] + 1} \right) \right. \\
 &\quad \left. - \dots \right) \\
 &= 2 \int_0^\infty dE_y \sqrt{E_y} \frac{1}{\exp[(E_y + E_z^{i_{ch}}(x_{\max}) - \phi_{FS})/k_B T] + 1} - 2 \int_0^\infty dE_y \sqrt{E_y} \frac{1}{\exp[(E_y + E_z^{i_{ch}}(x_{\max}) - \phi_{FS} + eV_D)/k_B T] + 1}
 \end{aligned}$$

ここで、

$$E_y / k_B T = y, \quad [\phi_{FS} - E_z^{i_{ch}}(x_{\max})] / k_B T = u, \quad [\phi_{FS} - eV_D - E_z^{i_{ch}}(x_{\max})] / k_B T = u'$$

と変数変換すると

$$\begin{aligned}
 I_0 &= 2 \int_0^\infty dy k_B T \sqrt{k_B T y} \frac{1}{1 + \exp(y - u)} - 2 \int_0^\infty dy k_B T \sqrt{k_B T y} \frac{1}{1 + \exp(y - u')} \\
 &= 2(k_B T)^{3/2} \int_0^\infty dy \frac{y^{1/2}}{1 + \exp(y - u)} - 2(k_B T)^{3/2} \int_0^\infty dy \frac{y^{1/2}}{1 + \exp(y - u')} \\
 &= 2(k_B T)^{3/2} \left[ F_{1/2} \left( \frac{\phi_{FS} - E_z^{i_{ch}}(x_{\max})}{k_B T} \right) - F_{1/2} \left( \frac{\phi_{FS} - eV_D - E_z^{i_{ch}}(x_{\max})}{k_B T} \right) \right]
 \end{aligned}$$

となる。ここでフェルミ・ディラック積分(4.33)を用いた。上式を式(4.62)に戻すと、名取の電流式(4.65)が導かれる。

付録 2: 式(4.66)の導出

2次元電子ガスの全エネルギーを、シリコン伝導帯の異方性を考慮して次式で与える。

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} + E_z^{i_s}$$

式(4.66)の計算に次の Herring-Vogt 変換を用いる。

$$k'_x = \left( \frac{m_d}{m_x} \right)^{1/2} k_x, \quad k'_y = \left( \frac{m_d}{m_y} \right)^{1/2} k_y$$

ここで  $m_d$  は任意の有効質量とする。このとき波数積分の変数は

$$dk_x dk_y = \left( \frac{m_x}{m_d} \right)^{1/2} dk'_x \cdot \left( \frac{m_y}{m_d} \right)^{1/2} dk'_y$$

と変換される。さらにエネルギー積分に変換する際には

$$\begin{aligned}
 E_{\mathbf{k}} &= \frac{\hbar^2}{2m_x} \frac{m_x}{m_d} k_x'^2 + \frac{\hbar^2}{2m_y} \frac{m_y}{m_d} k_y'^2 + E_z^{i_s} \\
 &= \frac{\hbar^2 k_x'^2}{2m_d} + \frac{\hbar^2 k_y'^2}{2m_d} + E_z^{i_s} \\
 &= \underbrace{\frac{\hbar^2 k_t'^2}{2m_d}}_{E_t} + E_z^{i_s}
 \end{aligned}$$

より、横方向エネルギー  $E_t$  は Herring-Vogt 変換後の波数  $k_t'$  を用いて

$$E_t = \frac{\hbar^2 k_t'^2}{2m_d}$$

の関係をを用いる。これらより

$$\begin{aligned}
 Q &= 2e \sum_{i_{ch}} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_0^{\infty} dk_x f_{FD}^{i_{ch}}(\phi_{FS}, k_x, k_y) + 2e \sum_{i_{ch}} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^0 dk_y \int_{-\infty}^0 dk_x f_{FD}^{i_{ch}}(\phi_{FS} - qV_D, k_x, k_y) \\
 &= 2e \sum_{i_{ch}} \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{(m_x m_y)^{1/2}}{m_d} \int_{-\infty}^{\infty} dk_y' \int_0^{\infty} dk_x' f_{FD}^{i_{ch}}(\phi_{FS}, k_x', k_y') + \dots \\
 &= 2e \sum_{i_{ch}} \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{(m_x m_y)^{1/2}}{m_d} \int_0^{\infty} dk_t' k_t' \int_0^{\pi} d\theta f_{FD}^{i_{ch}}(\phi_{FS}, k_t') + \dots \quad \left. \begin{array}{l} \text{円筒座標積分へ変換} \\ \end{array} \right\} \\
 &= 2e \sum_{i_{ch}} \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{(m_x m_y)^{1/2}}{m_d} \pi \int_0^{\infty} k_t' dk_t' f_{FD}^{i_{ch}}(\phi_{FS}, k_t') + \dots \\
 &= \sum_{i_{ch}} \frac{2e\pi}{4\pi^2} \frac{(m_x m_y)^{1/2}}{m_d} \frac{m_d}{\hbar^2} \int_0^{\infty} dE_t f_{FD}^{i_{ch}}(\phi_{FS}, E_t) + \dots \quad \left. \begin{array}{l} E_t = \frac{\hbar^2 k_t'^2}{2m_d} \text{より} \\ dE_t = \frac{\hbar^2 k_t'}{m_d} dk_t' \therefore k_t' dk_t' = \frac{m_d}{\hbar^2} dE_t \end{array} \right\} \\
 &= \sum_{i_{ch}} \frac{e}{2\pi\hbar^2} (m_x m_y)^{1/2} \int_0^{\infty} dE_t \frac{1}{\exp[(E_t + E_z^{i_{ch}}(x_{\max}) - \phi_{FS})/k_B T] + 1} + \dots \\
 &= \sum_{i_{ch}} \frac{e}{2\pi\hbar^2} (m_x m_y)^{1/2} (-k_B T) \left[ \ln \left\{ \exp[-(E_t + E_z^{i_{ch}}(x_{\max}) - \phi_{FS})/k_B T] + 1 \right\} \right]_0^{\infty} + \dots \\
 &= \sum_{i_{ch}} \frac{e k_B T}{2\pi\hbar^2} (m_x m_y)^{1/2} \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{\phi_{FS} - E_z^{i_{ch}}(x_{\max})}{k_B T} \right) \right] + \sum_{i_{ch}} \frac{e k_B T}{2\pi\hbar^2} (m_x m_y)^{1/2} \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{\phi_{FS} - qV_D - E_z^{i_{ch}}(x_{\max})}{k_B T} \right) \right] \\
 &= \frac{e k_B T}{2\pi\hbar^2} \sum_{i_{ch}} \sqrt{m_x m_y} \ln \left\{ \left[ 1 + \exp \left( \frac{\phi_{FS} - E_z^{i_{ch}}(x_{\max})}{k_B T} \right) \right] \times \left[ 1 + \exp \left( \frac{\phi_{FS} - qV_D - E_z^{i_{ch}}(x_{\max})}{k_B T} \right) \right] \right\}
 \end{aligned}$$

が導かれる。

## 5章 ナノMOSトランジスタ

### 5.1 ムーアの法則(MOSFETのスケージング則)

高度情報処理システムの根幹を支えるハードウェア技術として発展してきた大規模集積回路(VLSI)技術は、今では、自動車や航空機を始めとして、医療や金融といった社会的インフラのほとんどの分野において欠かすことのできない基盤技術となっている。VLSI技術の発展は、これまで基本的に、回路の最小構成ユニットであるSi MOSFETの高性能化によって支えられてきた。そして、このSi MOSFETの性能向上の指導原理は、**ムーアの法則**すなわち**比例縮小(スケージング)則**であった。しかしながら、最小微細化寸法が100nm以下の技術世代を迎えるに従い、チャンネル長の縮小化やゲート酸化膜の薄膜化といった寸法スケージングだけでは、十分な性能向上が難しいことが顕在化してきた。例えば、あるゲート絶縁膜厚以下では、直接トンネル電流が著しく大きくなり、**高誘電率(high-k)ゲート絶縁膜**の導入が必要となっている。また、ゲート長の微細化による**短チャンネル効果**を抑制するために、基板不純物濃度を高めると、実効電界の増加や不純物散乱の増大により移動度が低下し駆動電流が低下する。その結果、微細化だけでは期待される性能要求を満たすことがきわめて難しくなってきた。

このような状況に対し、スケージング則という従来の概念を超えた新材料および新構造の導入によりMOSFETの高性能化を実現する**テクノロジー・ブースター(Technology Booster)**が近年脚光を浴びている。具体的には、high-kゲート絶縁膜、ひずみSi/Ge/III-V族チャンネル材料、超薄膜SOI構造、ダブルゲート構造、3次元Fin構造、メタルゲート電極、メタル・ソース/ドレイン接合など、きわめて多彩で豊富なブースター技術が考えられている。これらの新技術を用いた場合には、同じ電源電圧、同じゲート絶縁膜厚のもとで、より高いオン電流を得ることができたり、基板不純物濃度の増大に頼ることなく短チャンネル効果を効率よく抑制することができると期待されている。配線に関しては、配線間の絶縁膜を誘電率の小さな材料に替えて配線遅延を抑制するlow-k絶縁膜技術などがある。現在はこれらブースター技術を投入しながら性能向上を促進するBooster Scalingの時代に入っている。

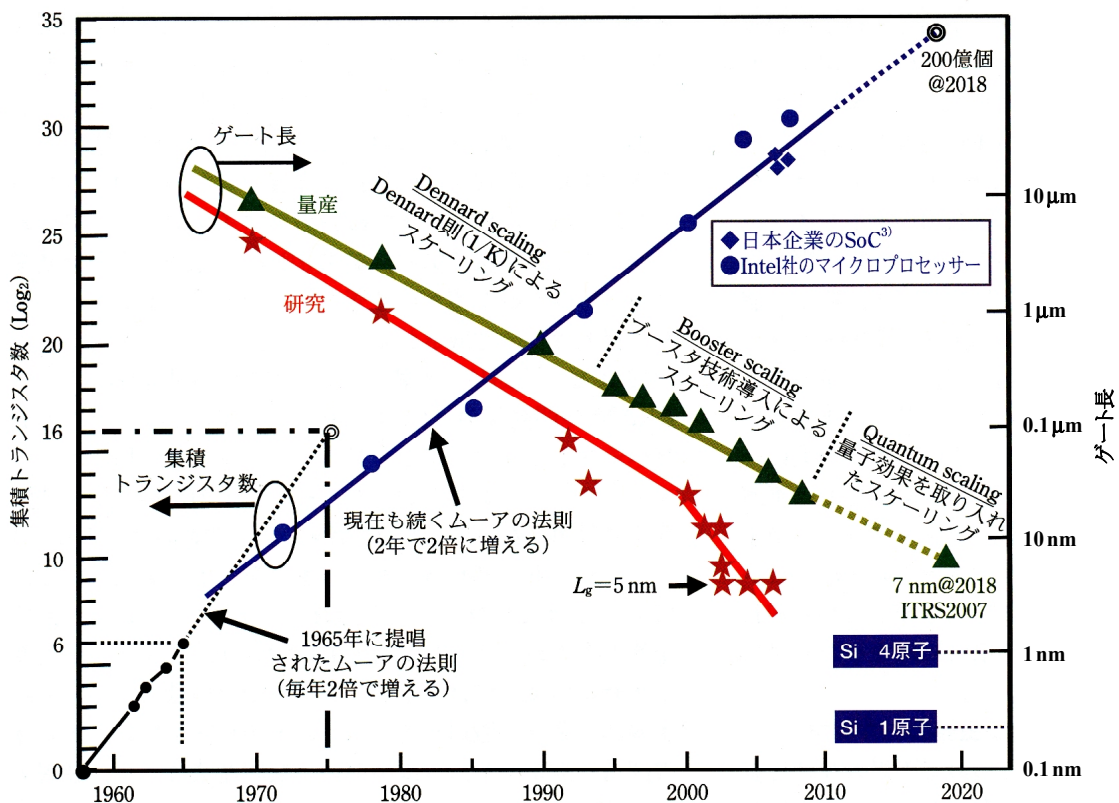


図 5.1 MOSFETの微細化のトレンド(ムーアの法則)[1].

Booster Scaling の後は、量子化サブバンドの制御、バリスティック輸送利用、低次元閉じ込め効果(ナノワイヤ、グラフェン等)の利用やトンネル MOS など、量子効果を活用しながら微細化する Quantum Scaling の時代に突入しようとしている。2007 年国際半導体技術ロードマップ(ITRS: International Technology Roadmap of Semiconductor)によれば、2018 年にはゲート長 7nm の集積回路が出荷されると推定されている。一方、研究開発レベルでは、2003 年～2006 年にゲート長 5nm の MOS トランジスタの特性がいくつかの研究機関から報告されている。シリコン結晶の格子定数は 0.357nm で、単位格子の一方方向には 2～3 個の原子があるから、5nm のゲート長はシリコン原子約 14 個程度の長さになる。このようなスケールになると、もはや分子デバイス(molecular devices)と呼んでもよい領域である。ゆえにカーボンナノチューブやグラフェン等を LSI へ応用する研究も進められている。

図 5.1 に MOSFET の微細化の推移を示す[1]。縦軸はチップに集積化されたトランジスタ数と MOS トランジスタのゲート長である。本章では、まず MOSFET の動作原理を復習した後、従来のスケールリング則である Dennard Scaling について簡単にまとめる。そしてゲート長の微細化により現れる様々な物理現象を理解し、Booster Scaling と Quantum Scaling の概念を学んでいく。

## 5.2 MOSFET の動作原理

MOS (Metal-Oxide-Semiconductor)の略からわかるように、MOSFET では金属-絶縁体-半導体接合が基本構造である。まず、金属-半導体接合から復習する。

**金属-半導体接触** 金属と半導体を接触させた場合、その仕事関数  $\phi_m$  と電子親和力  $\chi_s$  の大小関係から、図 5.2 に示すようにショットキー接触とオーミック接触の 2 通りがある。ショットキー接触の場合は界面に  $\phi_m - \chi_s$  の障壁ができるため、その電流-電圧特性は整流特性を示す。一方、オーミック接触の場合は通常の抵抗と同様にオームの法則にしたがった電流-電圧特性を示す\*。両者の電流-電圧特性の比較を図 5.3 に示す。ショットキー接触の順バイアスでの電流の立ち上がりが通常の pn 接合に比べて低電圧で起こる理由は問題 5.1 で考えてみよう。MOSFET をはじめ半導体デバイスでは、必ず外部端子との間に電極が設けられるが、金属-半導体間の接触抵抗を下げるために

- ・ 仕事関数が最適となる金属材料を選ぶ
- ・ ショットキー障壁が存在してもトンネル効果により電流が流れやすくなるように、ドーピング量の多い半導体を電極付近に用いる

などの工夫が施されている。

\* オーミック接触は不安定で実用には使われていないことに注意しよう。高濃度ドーピングなどを用いて、トンネリングでも実質的な抵抗を十分に下げたショットキー接触が一般的なオーミック電極の形成方法である。

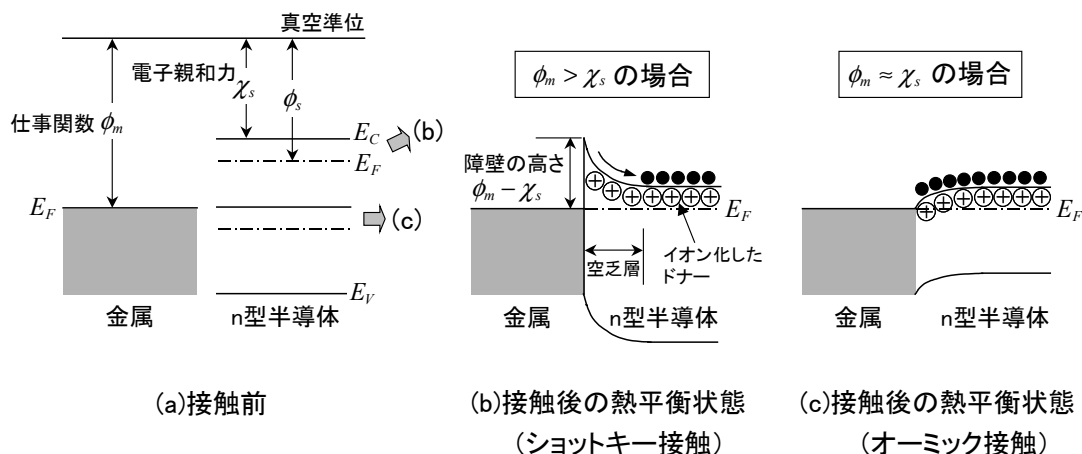


図 5.2 金属-n 型半導体接触.

[問題 5.1] 図 5.3 の電流－電圧特性で、ショットキー接触の電流が通常の pn 接合に比べて低い電圧で立ち上がる理由を説明せよ。ヒント：Al-Si 接触の場合、 $\phi_m = 4.42\text{eV}$ 、 $\chi_s = 4.05\text{eV}$  である。

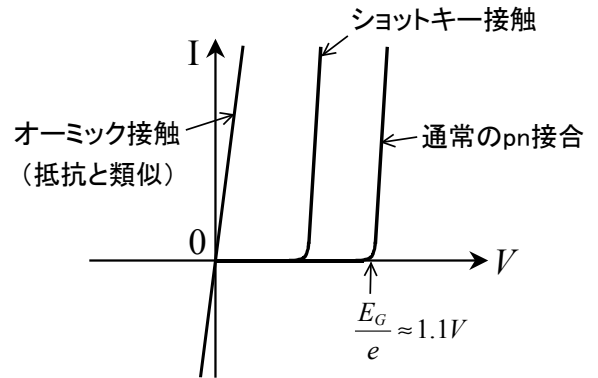


図 5.3 金属－半導体接触の電流－電圧特性.

**金属－絶縁体－半導体接合** 次に金属と半導体の間に絶縁体を挟んだ MOS 構造を考える。ここでは n チャンネル MOSFET を想定して、図 5.4 に示すように半導体材料は p 型 Si とする。絶縁体は  $\text{SiO}_2$  であり、その膜厚は十分に厚くトンネル効果などによるゲート漏れ電流は流れないと仮定する。この MOS 構造の金属電極に加える電圧を、負から正に変化させた時のポテンシャルエネルギー分布を図 5.5 に示す。ただし p 型 Si は常に接地している。まず  $V_G < 0$  の場合は、Si/ $\text{SiO}_2$  界面付近の価電子帯に基板内よりも多量の正孔が集められることになり、これを蓄積層とよぶ。一方、比較的小さな正の電圧 ( $V_G > 0$ ) を加えると、界面付近の正孔が基板内に押しやられキャリアが存在しない空乏層が発生する。次に十分に大きな正の電圧を加えると、今度は少数キャリアである電子が界面付近に誘起されることになる。これを反転層とよぶが、MOSFET では n 型ソースドレイン電極間の電流経路になるという意味からチャンネルともよばれている。

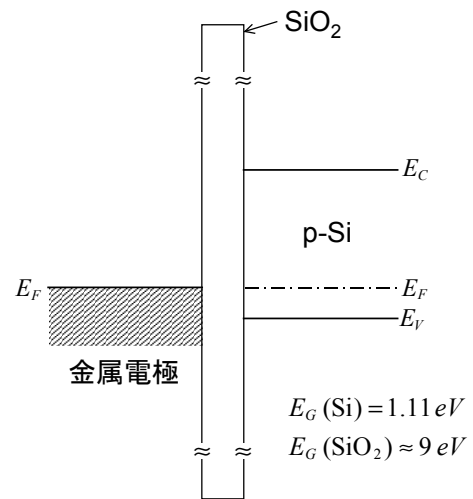


図 5.4 MOS 構造. フラットバンド電圧はゼロとしている(すなわち、酸化膜内電荷はゼロでかつ、金属／半導体間の仕事関数差もゼロ).

このように半導体の持つ優れた特性の一つに、ゲート電圧により半導体表面の電子状態が自由に制御可能であることが挙げられる(この他にも、ドーピングにより半導体の導電率を  $10^{-4} \sim 10^4 \Omega \cdot \text{cm}$  まで変化できることも他の材料にはない優れた性質の一つである)。 $V_G < 0$  では界面付近は p 型であるが、 $V_G \gg 0$  では n 型に変化させることができる。この制御性こそが半導体の特徴であり、カーボン系や有機系材料などに対する集積化デバイスとしての Si の優位性となっている。

MOSFET の基本構造を図 5.6(a) に示す。図 5.5 はこの図のゲート電極から p-Si 基板に向かってのポテンシャルエ

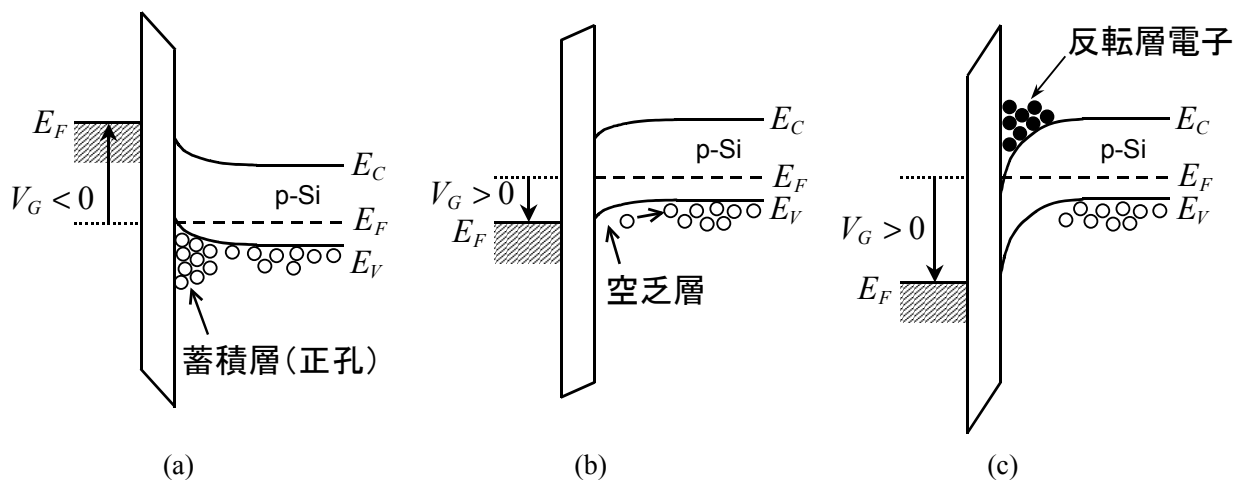


図 5.5 MOS 構造のポテンシャルエネルギー分布.



エネルギー分布を描いている。実際の集積回路では、図 5.6(b)に示すように n チャネル MOSFET と p チャネル MOSFET をペアにして、スイッチング素子の基本構成として用いている。これを CMOS(Complementary MOS)構造とよんでいる。CMOS 構造を用いると回路のオン/オフ切り替え時のみに電流が流れる仕組みを作ることができ、消費電力を大幅に抑制することが可能となる。

次に MOSFET の動作原理を図 5.7 を用いて説明する[2]。まずゲート電圧をゼロにして、ドレイン電圧のみを印加した場合を図 5.7(a)に示す。この場合はいわゆるオフ状態に相当する。すなわちゲート直下に反転層が形成されておらずソースからドレインに流れるキャリアは存在しないため電流はほぼゼロになる。ゲート電圧をしきい値付近まで大きくした場合は図 5.7(b)である。このときは半導体表面に反転層が形成され始めた段階にあり、僅かにソースからドレインに向かってキャリアが流れ始める。図 5.7(a)と(b)の間をサブスレシヨルド領域 (subthreshold region) とよび、その電流変化の急峻さをサブスレシヨルド係数(S 値)で表す。上記の動作原理では、ソースからチャネルに注入されるキャリア数は熱放出過程で支配されるため、S 値には下限が存在し室温では約 60mV/dec となる(この S 値はスケールングできないパラメータであるため LSI の低電圧化の障害となっている。詳しくは 5.6 新原理・新概念トランジスタを参照のこと)。さらにゲート電圧を大きくすると、図 5.7(c)のように反転層が形成されオン電流が流れる。これが現在の MOSFET の動作原理である。

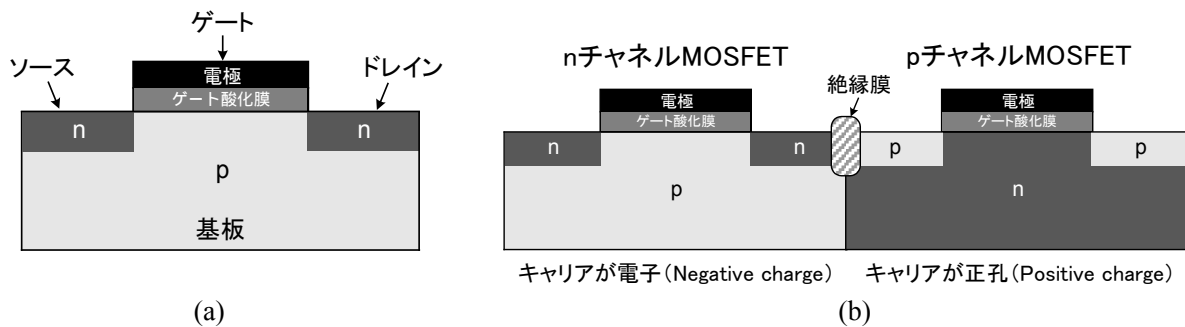


図 5.6 MOSFET の構造. (a) n チャネル MOSFET、(b) CMOS (Complementary MOS).

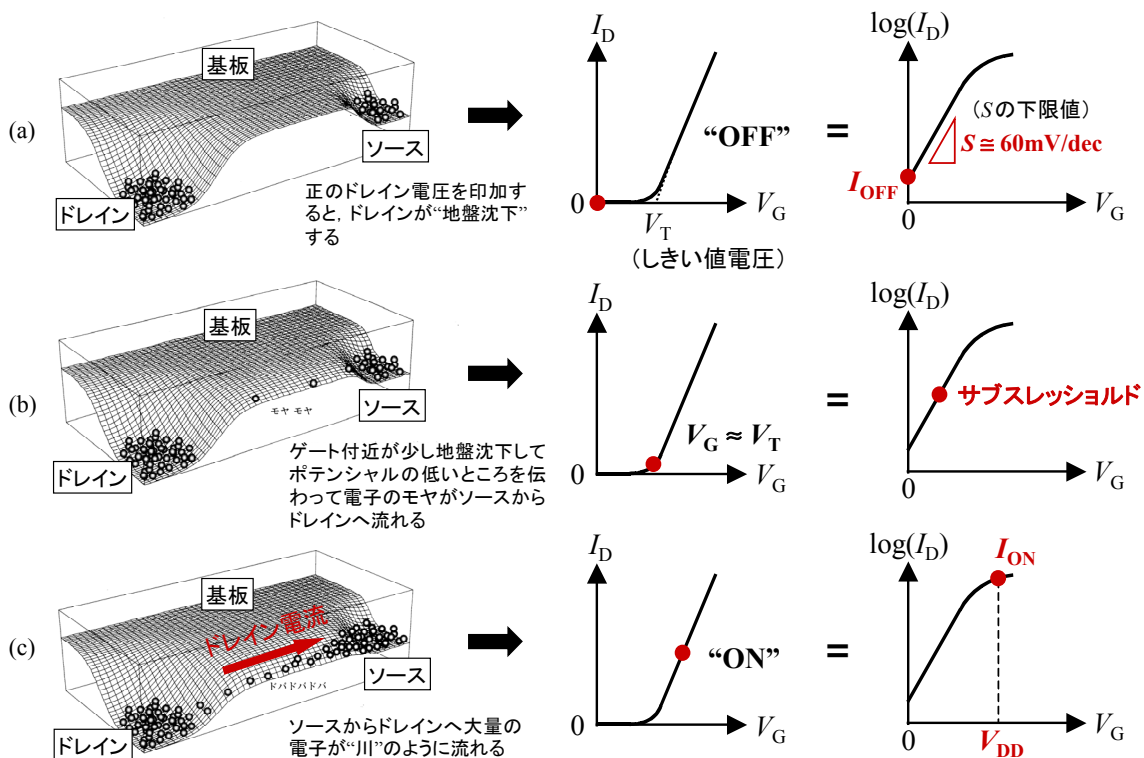


図 5.7 MOSFET の  $I_D - V_G$  特性[2].

## オン電流(電流駆動力)の支配要因

長チャネル MOSFET のオン電流(A)は次式で与えられる。

$$I_{ON} = \frac{W\mu}{2L_G} C_G (V_{GS} - V_T)^2 \quad (5.1)$$

ここで  $W$ :ゲート幅、 $L_G$ :ゲート長、 $\mu$ :キャリア移動度、 $C_G$ :単位面積当たりのゲート容量、 $V_{GS}$ :ゲート電圧、 $V_T$ :しきい値電圧を表す。キャリア移動度 $\mu$  は、MOS 構造の反転層移動度であり Si のバルク移動度(1,600cm<sup>2</sup>/V·s)とは異なることに注意が必要である(付録 A)。さて最近の MOSFET の高性能化は、オフ電流を抑制した状態でオン電流を如何に増大させるかにかかっている(次節 Dennard Scaling 参照)。同一電源電圧・同一ゲート幅の下でオン電流を増大させるには、ゲート長の微細化(→  $L_G$  縮小)、ゲート酸化膜厚の薄層化(→  $C_G$  増大)、ひずみ Si や Ge 等の高移動度チャネル材料の導入(→  $\mu$  増大)が有効であることが式(5.1)から分かる。しかしながら、図 5.1 に示したように MOSFET は過去 40 年以上の間、指数関数的に微細化が進んできた結果、ゲート長の微細化やゲート酸化膜厚の薄層化に伴う様々な物理現象が現れ始めており、単純デバイススケージングの行き詰まりによる性能向上の飽和が顕在化してきている[3]。それらについては後ほど詳しく述べることにして、次節ではまず、従来のスケージング(比例縮小)則である Dennard Scaling について説明しておく。

[問題 5.2] 式(5.1)を導出せよ。

## 5.3 Dennard Scaling (比例縮小則)

これは元々はチャネル内の電界を一定にすることを目的としたスケージング則(1/ $k$ スケージング)である。すなわち、ゲート電圧、ドレイン電圧をそのままにして単純にチャネル長を短くすると、チャネル中の縦方向、横方向電界がともに著しく高くなり、材料(SiO<sub>2</sub>、Si)自体の絶縁破壊が生じる。また、ソースとドレインの空乏層が重なり、パンチスルー現象が生じゲートによる電流の制御が効かなくなる(短チャネル効果の一つ)。これを避けるには、短チャネルデバイスにおける電界を長チャネルデバイスと同一にし、高電界によるデバイス特性の劣化を防ぐことである。以下に、Dennardらによって提案されたスケージング則を述べる。

- (1) MOSFET の平面方向(チャネル長、チャネル幅)および縦方向(ゲート酸化膜厚、ソース・ドレイン接合深さ)のすべての寸法を一定の比率( $k > 1$ )で縮小する。
- (2) 全ての電圧(ゲート電圧、ドレイン電圧など)を1/ $k$ にする。チャネルの平均電界  $E = V/L$  は一定に保たれる。
- (3) チャネル領域のドーピング密度を  $k$  倍にする。

図 5.8 に比例縮小の具体的な様子を示し、さらにデバイス・パラメータの縮小係数をまとめたものを表 5.1 に示す[4]。Dennard Scaling の重要な結論は、実は、チャネル内の電界を一定にすることよりもむしろ、デバイスを縮小することに

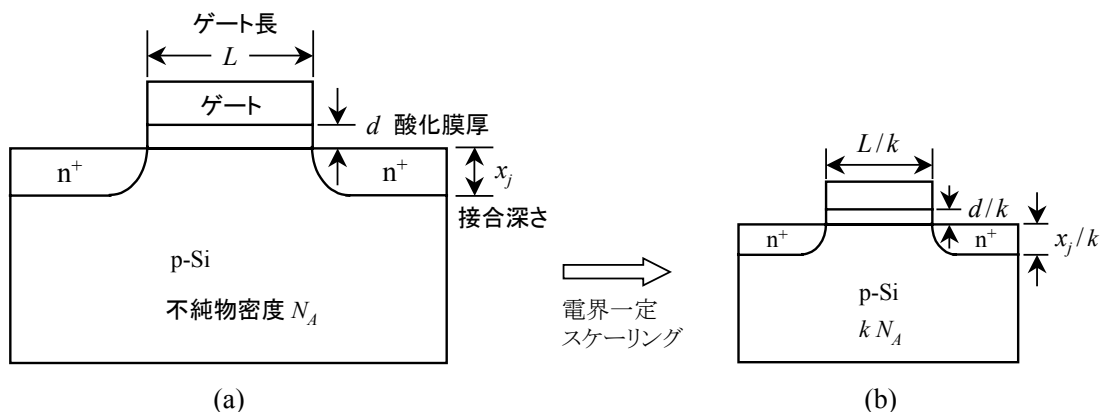


図 5.8 Dennard Scaling. (a)縮小前、(b)縮小後.

表 5.1 デバイス・パラメータ

デバイス・パラメータ	縮小係数
ゲート長 $L$	$1/k$
ゲート幅 $W$	$1/k$
ゲート酸化膜厚 $d$	$1/k$
接合深さ $x_j$	$1/k$
基板不純物密度 $N_A$	$k$
電圧 $V (V_{GS}, V_{DS}, V_T)$	$1/k$
電界強度 $E$	1

表 5.2 回路パラメータ

回路性能	縮小係数
電流 $I$	$1/k$
ゲート容量 $C$	$1/k$
遅延時間 $CV/I$	$1/k$
消費電力 $VI$	$1/k^2$
消費電力密度 $VI/A$	1

よって表 5.2 に示すように、スイッチング速度(遅延時間)が早くなり、かつ回路の消費電力密度を一定に保てる(増加しない)という点にある。この指導原理により LSI の高速化、高機能化、高信頼化が推し進められてきた。

[問題 5.3] 遅延時間が  $CV/I$  で与えられることを示しなさい。さらにそれが  $1/k$  にスケールリングされることを示しなさい。

[問題 5.4] 近年は電源電圧  $V$  のスケールリング、すなわち低電圧化が停滞しており、微細化に伴って LSI の消費電力(下記参照)が増大し続けている。電圧のスケールリングを阻む理由を調べてみよ。さらにその問題を克服するために進められている様々な取り組みについて調べてみよ。

MOSFET の消費電力  $P = fCV_{DD}^2 + I_{off}V_{DD}$  ( $f$ : 動作周波数,  $C$ : MOSFET が駆動する負荷容量,  $V_{DD}$ : 電源電圧,  $I_{off}$ : オフ時のリーク電流)

## 5.4 微細化に伴い出現する様々な物理現象

Dennard scaling の中身を理解しデバイス設計に反映させるには、微細化に伴い出現する様々な物理現象を理解することが重要である。

### 5.4.1 短チャネル効果[5]

短チャネル効果は MOSFET の素子寸法を小さくしたことから起こる効果の総称であり、代表的なものを以下に挙げておく。

- ・ しきい値電圧の低下
- ・ サブスレッショルド特性の劣化
- ・ キャリアの速度飽和
- ・ ホットキャリア発生による特性変動やゲート絶縁膜の絶縁破壊、など

上記の中、最も重要な効果は「しきい値電圧の低下」と「サブスレッショルド特性の劣化」である。素子寸法が小さくなると、チャネル領域における電界や電圧に、ソースおよびドレインからの影響が顕著に現れてくる。そのため、電界や電位の 1 次元近似ができなくなり、本来の 2 次元あるいは 3 次元的な電界分布・電位分布を考える必要が出てくる。短チャネル効果は、このような電界や電位の 2 次元分布の広がりから生じてくる。図 5.9 に示す短チャネル MOSFET

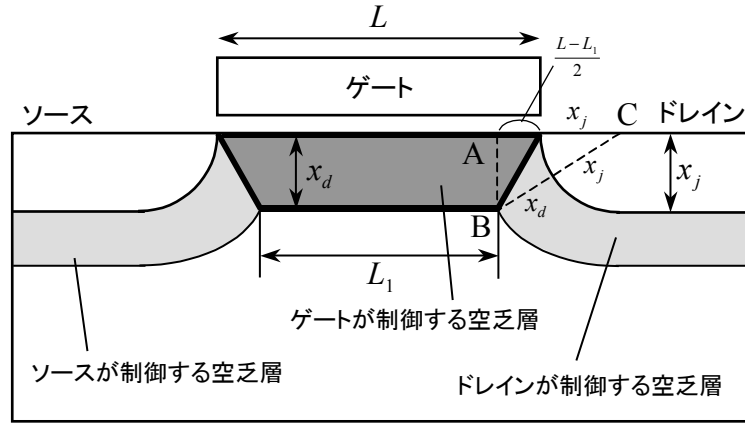


図 5.9 短チャネル MOSFET の断面模式図.

の構造で、しきい値電圧の低下について述べることにする。

### ■ しきい値電圧の低下

まず、しきい値電圧  $V_{th}$  の式を復習しておく。

$$V_{th} = V_{FB} + 2\phi_F + \frac{Q_B}{C_G} \quad (5.2)$$

ここで、 $V_{FB}$  はフラットバンド電圧、 $\phi_F$  は基板のフェルミ準位と真性フェルミ準位との電位差(図 B.1 参照)、 $Q_B$  は単位面積当たりの空乏電荷、 $C_G$  は単位面積当たりのゲート容量である。フラットバンド電圧  $V_{FB}$  は、ゲートと Si の仕事関数差  $\Phi_{MS}$  と酸化膜中の電荷  $Q_{OX} (> 0)$  によるポテンシャルの和で

$$V_{FB} = \Phi_{MS} - \frac{Q_{OX}}{C_{OX}} \quad (5.3)$$

と表される。 $C_{OX}$  は絶縁膜容量である。

ところで、 $Q_B$  とはチャネル直下のゲートで制御可能な空乏電荷に相当する。図 5.9 より、短チャネル MOSFET ではドレインおよびソース空乏層の影響によりゲートで制御可能な  $Q_B$  が減少し、しかもチャネル長が短くなるほど  $Q_B$  の減少が顕著になる。したがって、式(5.3)から分かるように  $V_{th}$  が低下するのである。

もう少し詳細に  $V_{th}$  の低下を議論する。まず、チャネル長が十分に長い MOSFET の  $Q_B$  を  $Q_{B, Long}$  と表すと、この場合はソースおよびドレインの影響が無視できるので

$$Q_{B, Long} = qN_A x_d \quad (5.4)$$

となる。 $q$ : 電荷素量、 $N_A$ : 基板不純物密度、 $x_d$ : 最大空乏層幅、 $L$ : チャネル長、 $W$ : チャネル幅とする。最大空乏層幅は次式で与えられる。

$$x_d = \sqrt{\frac{2\epsilon_s \epsilon_0 (2\phi_F)}{qN_A}} \quad (5.5)$$

次に、短チャネル MOSFET を考える。図 5.9 のように空乏層を 3 つの領域に分け、各領域の空乏電荷がそれぞれソース、ゲート、ドレインで制御されるとする(チャージシェアモデル)。ここでドレイン電圧  $V_{DS} = 0$  および基板電圧  $V_{BS} = 0$  の最も簡単な場合について短チャネル MOSFET の  $Q_B$  を求めてみる。ゲートで制御可能な空乏層領域は図のように台形となるので、台形内の空乏電荷は、 $Q_B$  が単位面積当たりであることを注意して

$$Q_B W L = qN_A x_d W (L + L_1) / 2 \quad (5.6)$$

となる。ドレインおよびソース領域の端を円で近似すると、三角形 ABC に対して三平方の定理が適用でき、各変数間の関係が次のように求められる。

$$\left(\frac{L-L_1}{2} + x_j\right)^2 + x_d^2 = (x_j + x_d)^2 \quad (5.7)$$

ここで  $x_j$  はソースおよびドレインの接合深さを表す。これらの式(5.4)、(5.6)、(5.7)より

$$Q_B = Q_{B, Long} \left[ 1 - \frac{x_j}{L} \left( \sqrt{1 + \frac{2x_d}{x_j}} - 1 \right) \right] \quad (5.8)$$

と求まる。 $Q_B / Q_{B, Long}$  はチャージシェア係数と呼ばれ、短チャネル効果による空乏電荷の減少の割合を示している。短チャネル MOSFET の  $V_{th}$  は、式(5.8)を式(5.2)に代入すると

$$V_{th} = V_{FB} + 2\phi_F + \frac{Q_{B, Long}}{C_G} \left[ 1 - \frac{x_j}{L} \left( \sqrt{1 + \frac{2x_d}{x_j}} - 1 \right) \right] \quad (5.9)$$

となる。 $L$  が短くなるに従い、長チャネルに比べ  $V_{th}$  が低下することが理解できる。また、 $V_{DS}$  を印加するとドレイン空乏層  $x_d$  が伸びるため、チャージシェア係数が減少し  $V_{th}$  はさらに低下する。

ここで式(5.9)より、 $V_{th}$  の低下を抑制する方法として以下の三つが考えられる。

1.  $C_G$  を大きくする  $\Rightarrow$  ゲート酸化膜を薄くする(チャネルにゲートを近づける、ゲートの影響を大きくする)
3. 空乏層幅  $x_d$  を小さくする 基板の不純物密度を高くする(式(5.4)より)
3. 接合深さ  $x_j$  を小さくする

これらにより、ソースおよびドレイン空乏層のチャネル直下へのくい込みを抑えることができる。なお、ドレイン電圧を下げ、ドレイン空乏層の影響を小さくすることも有効である。表 5.1 より、これらの方法はいずれもスケール則の方向と一致していることが分かる。したがって、スケール則に沿って微細化すれば、短チャネル効果はほぼ抑えられることが確認できる。

図 5.10 に  $V_{th}$  のゲート長依存性を示す。この図は、しきい値電圧が低下する様子から  $V_{th}$  ロールオフ特性ともよばれ、短チャネル効果の大きさを定量的に評価する手段として用いられる。このようにゲート長が短くなると急激に  $V_{th}$  が低下するが、MOSFET の設計では、上で述べた  $t_{ox}$ 、 $x_j$ 、 $N_A$  をスケールすることにより、このロールオフ特性を抑えている。なお、短チャネル効果が現れても、次に述べるサブスレッショルド特性が劣化しない限り、MOSFET は単体デバイスとしては正常に動作する。ところが、図 5.10 に示すとおり、短チャネル効果により  $V_{th}$  がゲート長に非常に敏感に依存するようになる。VLSI を実際に製造する場合、ゲート長の寸法精度は通常 10~15%程度である。したがって、製造段階でゲート長がばらつくと  $V_{th}$  も大きくばらつくことになり、正常な回路動作が得られなくなる。したがって、短チャネル効果を抑制して  $V_{th}$  がゲート長に依存しなくなることが必須なのである。

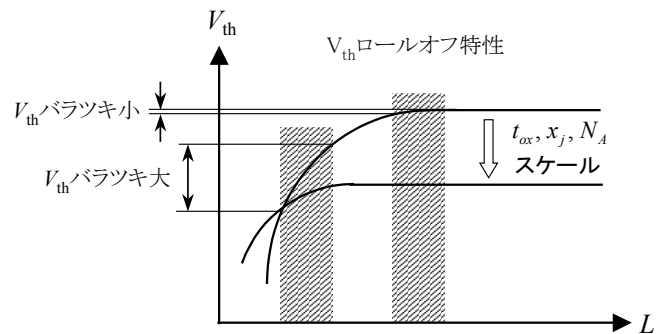


図 5.10 しきい値電圧のゲート長依存性.

[問題 5.5] 式(5.8)を導出せよ。

## ■ サブスレッシュヨルド特性の劣化

ゲート電圧がしきい値電圧以下の場合のサブスレッシュヨルド特性はもともとスケールしない現象であるが、短チャネル MOSFET では、図 5.11 に示すように  $S$  値が理想値の  $60\text{mV/dec}$  より大幅に増大してしまう。サブスレッシュヨルド電流の増加は待機時電流の増加を意味するので、特に携帯機器向けの超低消費電力デバイスでは、サブスレッシュヨルド特性の改善が大きな課題である。

MOSFET のチャネル長が短くなると、ソースの空乏層とドレインの空乏層が近づく。そうすると、いわゆるパンチスルー現象が起こって、もはやドレイン電流をゲートで制御不能となり  $S$  値が大幅に増大してしまう。このとき大きなドレイン電圧を印加すると、 $V_{th}$  が低下するだけでなく、サブスレッシュヨルド特性はさらに劣化する。長チャネル MOSFET では  $S$  値はドレイン電圧にほとんど依存しないが、短チャネル MOSFET では、ドレイン電界の影響がソースにまで及び、サブスレッシュヨルド電流がドレイン電圧に依存するようになる。

この現象は **DIBL (Drain Induced Barrier Lowering)** とよばれている。図 5.12 にチャネル中のポテンシャル分布を示す。ゲート長が長い場合はソースとチャネルの間に高い障壁が存在するが、チャネル長が短くなるとドレイン空乏層の影響で障壁が低くなり、パンチスルーが起こる。

この状態でドレイン電圧を印加すると、ソース／チャネル間の障壁がさらに下がり、大きなサブスレッシュヨルド電流が流れるようになる。したがって、 $S$  値は大幅に劣化するのである。 $S$  値の劣化を抑制する方法についても、しきい値電圧の低下と同様に  $t_{ox}$ 、 $x_j$ 、 $N_A$  をスケールする方法が取られている。

短チャネル効果のこの他の影響として、 $I_D - V_D$  特性のドレイン電流が強反転条件下で飽和しなくなること、ドレイン電流がゲートオーバードライブ、すなわち  $(V_G - V_{th})$  に比例することなどがある。ドレイン電流が飽和しない理由は様々な要因が複合的に絡み合った結果である。一つはしきい値電圧がドレイン電圧とともに低下すること、二つ目はピンチオフ点がドレインから離れることによるチャネル長変調効果が主な原因である。一方、ドレイン電流が  $(V_G - V_{th})$  に比例する理由は、チャネル方向の電界が高くなりドリフト速度が飽和することによる。ドレイン電流が  $I_D \propto (V_G - V_{th})^\alpha$  と表されることを  **$\alpha$  乗則 (alpha-power law)** とよぶが、長チャネルで速度飽和が起こらない場合は  $\alpha = 2$  (式(5.1)参照) となり、短チャネルで**速度飽和 (saturation velocity)** が起こっている場合は  $\alpha = 1$  になる。

### $\alpha$ 乗則とバリスティック輸送

チャネル長がキャリアの平均自由行程と同程度以下にまで微細化されると、チャネル内で起こる散乱回数が数回程度以下にまで減少し、究極的には一度も散乱されない**バリスティック輸送 (ballistic transport)** が起こると考えられている。このようなバリスティック極限では、 $\alpha$  乗則は  $\alpha = 1.5$  になると言われている[6]。MOSFET で実際にバリスティック輸送が起こることを実験的に実証する手段として、 $\alpha$  値の変化に注目した研究も進められている[7]。最先端の MOSFET では  $\alpha \approx 1.3$  にあると言われている。

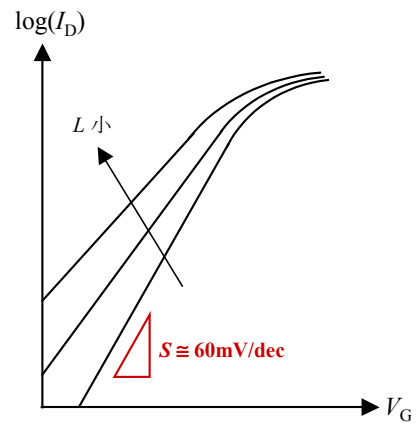


図 5.11 サブスレッシュヨルド特性のゲート長依存性。

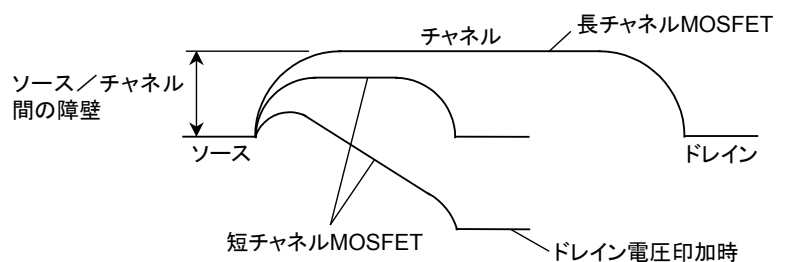


図 5.12 MOSFET における表面電位の横方向分布の模式図(サブスレッシュヨルド領域)。

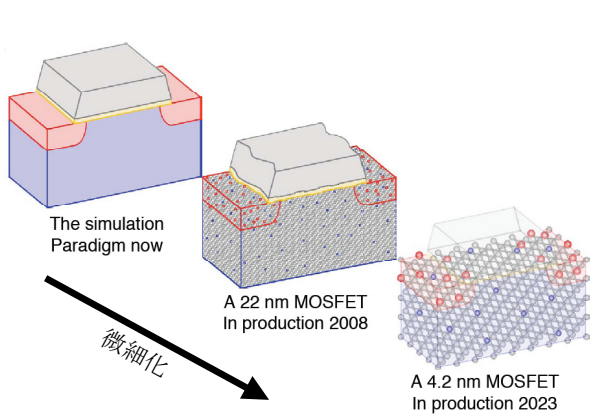


図 5.13 微細化に伴う不純物分布の離散性の出現.

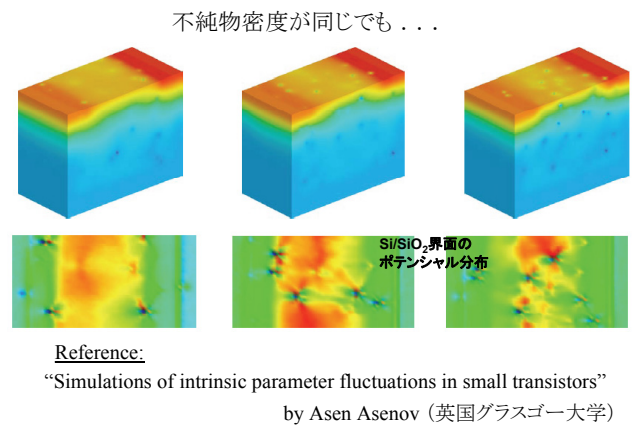


図 5.14 離散的な不純物揺らぎのポテンシャル分布への影響.

### 5.4.2 離散不純物揺らぎ[8]

今や1チップ上にはゲート長が100nm以下のトランジスタが1億個以上も集積されている。ところが、微細化の進展に伴い、これまでに述べてきた物理現象に加えて、新たな問題が発生している。トランジスタの「特性ばらつき」である。特性ばらつきとは、設計上同じレイアウトで同じサイズのトランジスタであっても、製造された素子のしきい値電圧やドレイン電流等の特性が、個々のトランジスタごとに異なる値を示すという現象である。その結果、個々のトランジスタは正常に動作しているにもかかわらず、回路としては正常に動作しなかったり、回路の動作マージンが著しく減少したりして、製造歩留まりが急激に低下するなどの現象が引き起こされている。

この特性ばらつき問題は、微細化が進むと更に顕在化する恐れがある。すなわち、特性ばらつきがトランジスタの微細化限界を決定する要因となる可能性がある。ところが、特性ばらつきには様々な種類が存在し、その原因は、原子レベルの離散的な不純物分布から半導体材料、製造装置に至るまで多岐にわたっている。ここでは、最も重要なばらつきの原因とされている**離散不純物揺らぎ**を紹介する。

離散不純物揺らぎは、MOSトランジスタのチャンネル空乏層中に不純物がランダムに離散的に分布しており、個々のトランジスタごとに不純物の個数や位置が異なるために引き起こされる特性ばらつきである。一般に、ランダムに分布している不純物の数は統計的に決まり、ポアソン分布に従うことが知られている。ポアソン分布では、個数の平均を $n$ とすると、その分布の標準偏差 $\sigma$ は $\sqrt{n}$ で与えられるという特徴がある。すなわち、デバイスサイズが小さくなってチャンネル不純物の個数が減るほど、平均個数に対するばらつきの割合( $\sigma/n = 1/\sqrt{n}$ )が大きくなり、その結果、特性ばらつきが大きくなる(図 5.13, 5.14)。

MOSトランジスタの $V_{th}$ は式(5.2)と(5.4)より

$$V_{th} = V_{FB} + 2\phi_F + \frac{qN_A x_d}{C_G} \quad (5.10)$$

で与えられる(ここではソースおよびドレインの影響を無視する)。 $N_A x_d$ は空乏層中の単位面積当たりの不純物個数に相当するが、上述のとおり、この個数がトランジスタごとにばらつくために $V_{th}$ もばらつくことになる(図 5.14)。

前にも述べたとおり、特性ばらつき問題はトランジスタの微細化限界を決定する要因となる可能性があるだけでなく、低電圧化の障害にもなっている。そもそも $V_{th}$ ばらつきの支配的要因はチャンネル中の離散不純物であるため、チャンネル中の不純物を極力減らしたデバイス構造が採用されれば、 $V_{th}$ ばらつき問題はかなり解決されることになる。一般にバルクMOSトランジスタでは、チャンネルに不純物を導入することによって短チャンネル効果を抑制しているため、不純物密度を下げることは困難である。そこで、短チャンネル効果を抑制しつつ不純物密度を下げられるデバイス構造として、**完全空乏型(Fully-depleted Silicon-On-Insulator: FD-SOI)**基板上のトランジスタが注目されている。

図 5.15 に FD-SOI トランジスタの模式図を示す。FD-SOI トランジスタでは、SOI 膜厚を空乏層幅よりも十分に薄く

できるため ( $x_{dmax} > T_{Si}$ )、チャネル内の不純物数を極力減らすことができる。また、埋込酸化膜 (Buried Oxide: BOX) の厚さを 10nm 程度にまで薄くすると、チャネル不純物密度  $N_{SOI}$  を小さくしたまま、基板不純物密度  $N_{SUB}$  を変えることで  $V_{th}$  を調整することもできる。しかもこの構造では、基板バイアス効果によって  $V_{th}$  を調整することも可能である。

さらに、イントリンシックチャネルで短チャネル効果を抑制する構造として、三次元的な構造を有する Fin FET やナノワイヤトランジスタが有望視されている。しかし、これらの三次元構造デバイスでは、ランダムな不純物揺らぎの影響は抑えられるものの、わずかなデバイスサイズのばらつきによって極めて敏感に  $V_{th}$  が変化することが分かっており、サイズばらつきを許さないプロセス技術の発展が不可欠となる。しきい値の制御方法も重要な課題である。不純物を使わない別の方法、すなわちゲート電極材料の仕事関数制御によって  $V_{th}$  (直接的には式(5.10)の  $V_{FB}$ ) を調整しなければならない。

さらに特性ばらつきを抑制して微細化を進めるためには、チャネルだけでなくソースとドレインの不純物もなくすることが望ましい。そこで、ショットキーソースドレイントランジスタのように、ソース・ドレイン部分もメタルとし、一切不純物を含まない「ばらつかないトランジスタ」の研究も進められている。

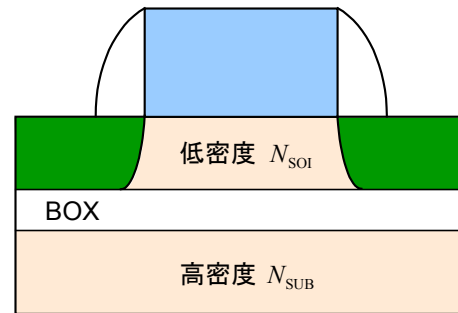


図 5.15 FD-SOI トランジスタ。

**[問題 5.6]**  $N_A = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  のときのアクセプター間の平均距離を計算せよ。その値から、チャネル長が 30nm、チャネル幅  $W = 30\text{nm}$  のトランジスタで、空乏層幅が  $x_d = 10\text{nm}$  の場合に、ソース・ドレイン間の空乏層中に平均何個の不純物が存在するか考えてみよ。

### 5.4.3 量子力学的効果[9] (反転層量子化、トンネル効果)

図 5.16 に、MOS ゲートスタック構造の模式的なバンド構造を示す。これまで 40 年以上使われてきたゲート絶縁膜である  $\text{SiO}_2$  は、2nm 以下に薄膜化されると量子力学的トンネル効果により反転層からゲートに大量の電流が流れ、消費電力の著しい増加を引き起こす。これを避けるためには、ゲート絶縁膜の物理膜厚を厚くする必要があるが、一方で、短チャネル効果を抑制したりオン電流を大きくするには、ゲート容量を増大させることが必須である。

これらの要求を同時に達成するには、 $\text{SiO}_2$  より誘電率の高い材料をゲート絶縁膜として使用することが必要となる。これがいわゆる high- $k$  ゲート絶縁膜であり、まず低消費電力 LSI への適用を目指して精力的な研究開発が進められている。

さて、 $\text{SiO}_2$  ゲート絶縁膜が極めて薄くなってきた結果、反転層キャリアの量子化による反転層の厚さそのものがデバイス性能に重要な影響を及ぼすようになってきた(付録 B)。ゲート容量は、絶縁膜容量とゲート電極の容量、反転層自身の容量の直列接続で表される(付録 C)。絶縁膜の薄膜化とともに、反転層容量の影響が相対的に大きくなってきた結果、ゲート容量は絶縁膜容量よりもかなり低下してしまう。 $\text{SiO}_2$  膜厚に換算した反転層の厚さは、電源電圧付近で、電子で 0.55nm、正孔で 0.7nm 程度であるので、絶縁膜厚と比較しても大きな影響となりつつある。反転層の厚みの影響が見えてきたこ

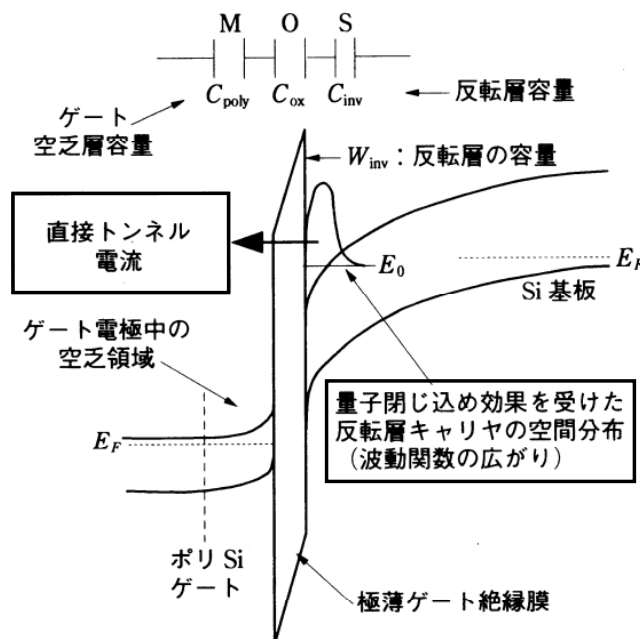


図 5.16 MOS ゲートスタック構造[9].



とは、ゲート容量がその物理的極限に近づいていることを表している。また、反転層容量の存在は、反転層キャリアを誘起するためには有限のポテンシャル変化が必要であることを意味している(付録 C)。このため、一定のキャリア数を確保するための表面ポテンシャルの変化量が、電源電圧の下限値を与えることになる。さらに、オフ時のチャンネル電流を抑えるためには、しきい値もスケールできない量である。これらの限界要因のため、実効膜厚ゼロの理想的な high- $k$  ゲート絶縁膜が実現できたとしても、性能を落とすことなく 0.5V 以下の電源電圧を実現することは難しいと考えられている(Si の場合)。

上で述べた現象は、MOSトランジスタの縦方向スケールに伴う量子力学的現象のデバイス特性への影響である。一方の横方向スケール、すなわちゲート長の縮小により、チャンネル方向のトンネル効果も観測されるようになってきた。これには主に 2 種類あり、ソースからドレインに直接トンネルする**ソース・ドレイントンネリング (source-drain tunneling)** と、基板からドレインへトンネルする**バンド間トンネリング(Band-To-Band-Tunneling)**がある(図 5.17)。両者ともオフリーク電流を発生させ電子機器の消費電力を増大させる(S 係数を増大させる)ため深刻な問題である。バンド間トンネリングは短チャンネル化や基板不純物密度の増加に伴うドレイン端の高電界化が原因で発生するが、その電流の大きさはバンドギャップに指数関数的に依存するため、バンドギャップの小さな Ge や InAs 等の高移動度材料では特に深刻になる。バンド間トンネリングを抑制するには電源電圧の低減が有効であることが分かっている。

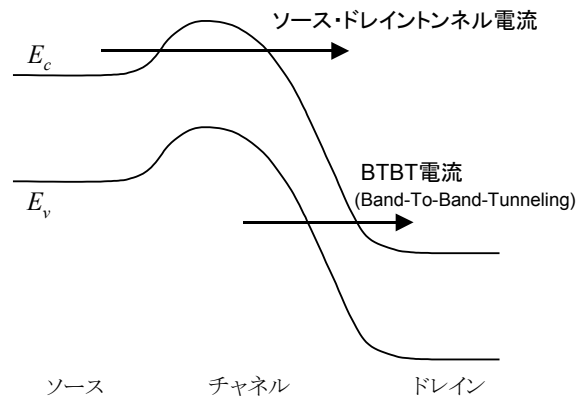


図 5.17 ソース・ドレイン間トンネル電流とチャンネル・ドレイン間トンネル電流.

#### 5.4.4 バリスティック輸送

チャンネル長がキャリアの**平均自由行程 (mean free path)**と同程度以下にまで微細化されると、チャンネル内で起こる散乱回数が数回程度以下にまで減少し、究極的には一度も散乱されない**バリスティック輸送 (ballistic transport)** が起こると考えられている[10,11,12]。シリコン MOSFET の電子の平均自由行程がおおよそ数 nm~数十 nm(室温)とされているので、チャンネル長が 10nm に近づくと散乱による十分なエネルギー緩和を前提とする移動度という概念は成立しなくなる。図 5.18 に示すようにバリスティック輸送は、いわゆる真空管を走る電子の振る舞いと似ており、バリスティック輸送が影響し始める極短チャンネル MOSFET の伝導モデルは、従来の抵抗性チャンネルを記述するドリフト・拡散伝導モデルからの見直しが必要となる。

バリスティック輸送には、ゲート酸化膜厚等のスケールを行なわなくても MOSFET の**電流駆動力 (current drive)** を増大させる効果が期待されている。しかし有限の長さを有する MOSFET では、少なくとも室温では完全バリスティック輸送の実現は難しく[13]、散乱回数が数回程度以下となる**準バリスティック輸送 (quasi-ballistic transport)** を考える必要がある[14]。完全バリスティック輸送下ではソースから注入されたキャリアが全てドレインに到達するため、このときのドレイン電流はソース端でのキャリアの熱速度あるいはフェルミ速度とキャリア密度の積で決定される。したがってドレイン

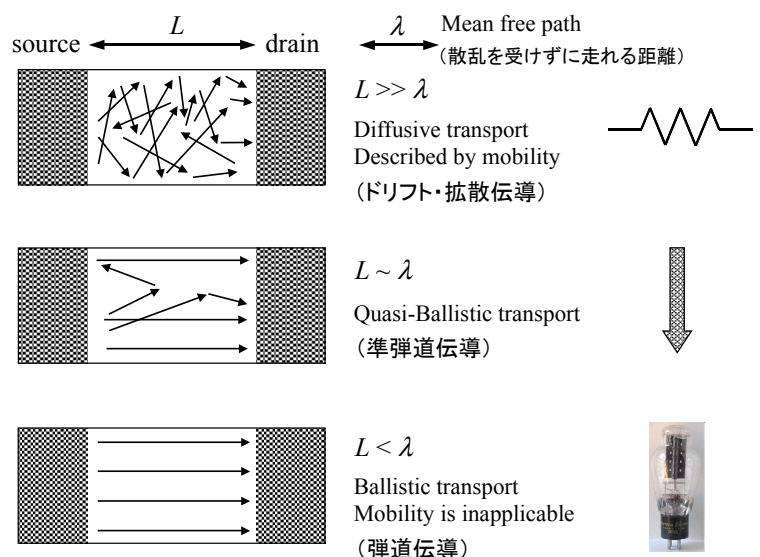


図 5.18 チャンネル長とキャリア伝導機構の関係[12].

電流の大きさはチャネル長やドレイン電圧に依存せず、MOSFET として得られる最大の電流値を与える。このため素子性能の観点からは、この電流値が微細化の到達点となる。

一方、準バリスティック輸送下ではチャネル内で散乱されたキャリアの一部が後方のソースに向かって進み、図 5.19 に示すポテンシャル障壁を超えてソースまで戻されると、ドレイン電流は完全バリスティック極限の値から減少する。チャネルのソース端に形成されるポテンシャル障壁は**ボトルネック (bottleneck)** とよばれ、ソースからチャネルに注入されるキャリアの振る舞いを制御している。またキャリアがチャネル内で散乱されソースに戻される確率は**後方散乱確率 (backscattering coefficient)** とよばれ、 $Q_f$  および  $Q_b$  をそれぞれ前方と後方電流電荷量として

$$R = \frac{Q_b v_{back}}{Q_f v_{inj}} \quad (5.11)$$

で定義される。このときドレイン飽和電流  $I_{sat}$  は後方散乱確率  $R$  を用いて次式で与えられる[11]。

$$I_{sat} = Q v_s = Q v_{inj} \times \frac{1-R}{1+R(v_{inj}/v_{back})} \quad (5.12)$$

上式は式(5.11)の定義と  $Q v_s = Q_f v_{inj} - Q_b v_{back}$  および  $Q = Q_f + Q_b$  の関係から導かれる(問題 5.6)。さらに注入速度 (injection velocity)  $v_{inj}$  と後方速度  $v_{back}$  が等しいと近似すると

$$I_{sat} \cong Q v_{inj} \times \frac{1-R}{1+R} \quad (5.13)$$

となり、Lundstrom の式が導かれる[14]。式(5.13)右辺の  $(1-R)/(1+R)$  の項が示す物理的意味を考察しておく。まず分子の  $(1-R)$  は、チャネル内で後方散乱されボトルネックまで戻ってきたキャリアによる電流の減少分を表している。一方、分母の  $(1+R)$  は、後方散乱で  $Q_f + Q_b$  に増えた電荷量をゲート容量とゲート電圧で決まる誘起電荷密度 ( $Q = C_G V_G$ ) に戻すために、注入電荷量  $Q_f$  が減らされることによる電流の減少分を表している。つまり分母の  $(1+R)$  はゲート電極の効果を検討した因子であり、MOSFET の準バリスティック輸送の議論では重要な項となる。

式(5.13)に戻り準バリスティック輸送の説明を続ける。バリスティック極限では  $R = 0$  なので、式(5.13)は  $I_{sat}^{ballistic} = Q v_{inj}$  となる。名取の電流式(4.65)はこの  $I_{sat}^{ballistic}$  を与えている[10,11]。このようにバリスティック輸送下での MOSFET のドレイン飽和電流は、短チャネル MOSFET で言われてきた飽和速度に代わり、ソースからチャネルへの注入速度  $v_{inj}$  で律速されると考えられるようになってきた。一方、準バリスティック輸送下でのドレイン飽和電流は、式(5.13)が示すように、絶縁膜厚・しきい値・ゲート電圧一定の下では誘起キャリア密度は一定 ( $Q = \text{一定}$ ) であるので、注入速度と後方散乱確率で決定されることが分かる(注入速度は名取モデルの式(4.67)から計算することができる)。後方散乱確率はチャネル内でのキャリア散乱現象によるものであり、正確な値を見積もるためには様々な散乱機構を考慮した詳細な数値計算が必要となる。ただし付録 D で説明するように、チャネル内で散乱されて実際にソースまでキャリアが戻される確率  $R$  は、主にチャネルのソース端付近で発生する散乱が支配的になると考えられている。この領域を **kT レイヤ (kT-layer)** とよんでいる[14]。これはシリコンの散乱が等方性散乱であるという性質から導かれるもので、この kT レイヤの長さを  $L_{kT}$ 、平均自由行程を  $\lambda$  とすると、ドレイン電流の飽和領域では

$$R = \frac{L_{kT}}{L_{kT} + \lambda} \quad (5.14)$$

と表すことができる。上式は、チャネル内の散乱確率が同じ場合 ( $\lambda = \text{一定}$ : たとえば同一材料・同一電源電圧)、後方

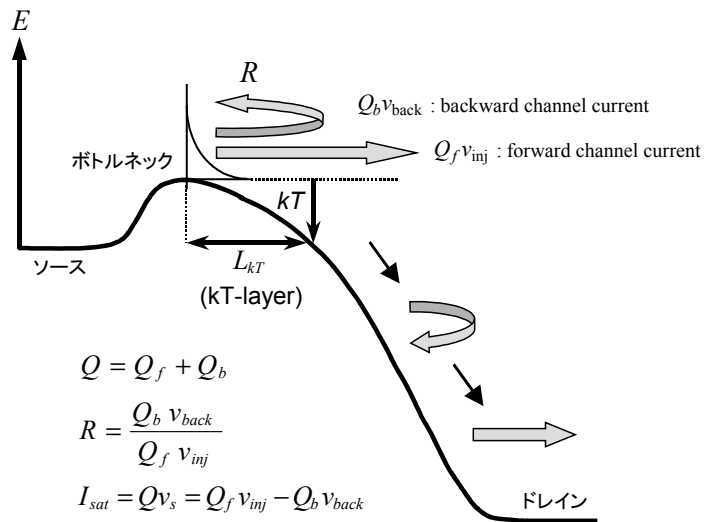


図 5.19 MOSFET の準バリスティックモデル。

散乱確率はチャンネル長ではなく  $kT$  レイヤ長で決まることを表している。すなわち、 $kT$  レイヤを短くすることがバリスティック効率を向上させ MOS トランジスタの電流駆動力を向上させるという指針が導かれる[15]。式(5.14)の理論的な導出については付録 E を参照のこと。

[問題 5.7] 飽和電流の式(5.13)を導出せよ。

## 5.5 テクノロジー・ブースター

前節で述べたように微細化に伴う様々な物理的要因により、微細化だけでは期待される性能要求を満たすことがきわめて難しくなってきた。このような状況に対し、スケーリング則という従来の概念を超えた(微細化に頼らない)新材料および新構造の導入により MOSFET の高性能化を実現するテクノロジー・ブースター(Technology Booster)が近年脚光を浴びている。具体的には、high- $k$  ゲート絶縁膜、ひずみ Si/Ge/III-V 族チャンネル材料、超薄膜 SOI 構造、ダブルゲート構造、3次元 Fin 構造、メタルゲート電極、メタル・ソース/ドレイン接合など、きわめて多彩なブースター技術が考えられている。現在はこれらブースター技術を投入しながら性能向上を促進する **Booster Scaling** (あるいは **Post Scaling**) の時代に入っている。本節では、代表的なブースター技術について解説する。

### 5.5.1 サブバンド構造変調効果(ひずみ Si/超薄膜 SOI 構造による量子化サブバンド制御)[16]

⇒ 移動度の増大、 $I_{ON}$  の増大(高速化、低電圧化) etc.

式(5.1)で述べたように、MOS トランジスタのオン電流を増大させるには移動度の増大が有効である。移動度  $\mu$  はキャリアの有効質量  $m$  と散乱による緩和時間  $\tau$  を用いて次式で定義される。

$$\mu = \frac{e\tau}{m} \tag{5.15}$$

MOS の反転層移動度はバルク移動度とは異なり、動作条件によって、クーロン散乱、フォノン散乱、界面ラフネス散乱の役割が変化する。詳しくは付録 A を参照のこと。ひずみ Si 技術は、チャンネル層の Si に引張りひずみ、あるいは圧縮ひずみを加えることで移動度を向上させる技術である。一方、超薄膜チャンネル技術は、反転層の厚さよりも薄い SOI 構造にキャリアを閉じ込めることで移動度を向上させる技術である。これら二つの技術による高移動度化の本質は、移動度のより高いサブバンドにキャリアを優先的に分布させるところにある。それでは、これら二つの技術によってどのように高移動度化が実現できるかを以下で説明する。

第 2 章で学んだように、Si の伝導帯最下端のバンド構造は X 点付近に 6 つの等価な回転楕円体形状の等エネルギー面を持っている(図 2.15(b)参照)。したがって Si (100)面を MOS 界面とした場合、そこに閉じ込められた 2 次元電

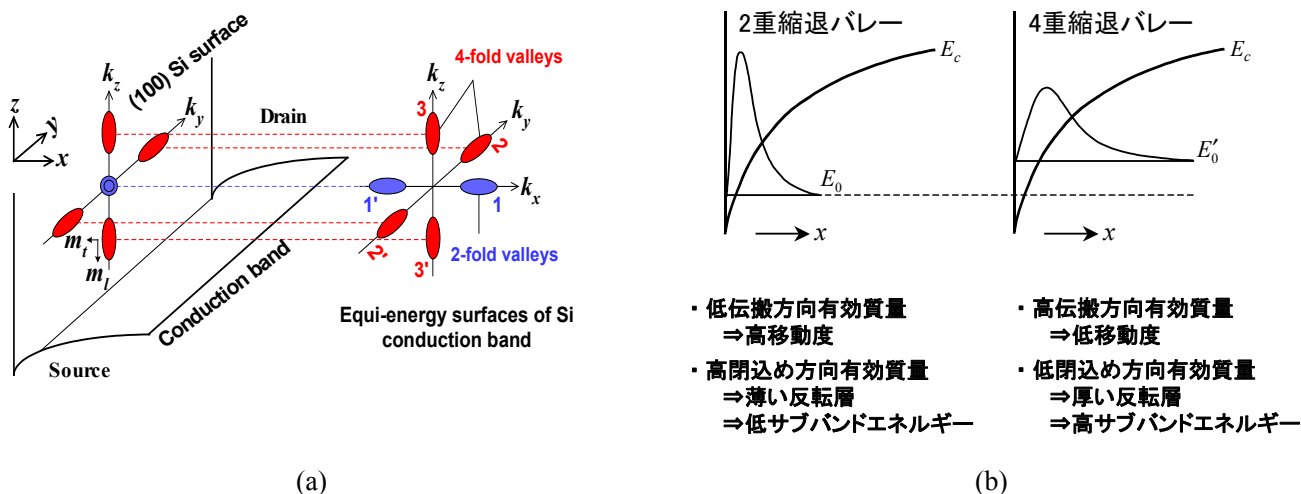


図 5.20 Si(100)面 MOS 反転層のサブバンド構造.

子ガスのバンド構造は、図 5.20 に示すように 2 種類のサブバンド列を形成することになる<sup>(\*)</sup>。すなわちバレー1、1'は縦有効質量  $m_l$  で閉じ込められるのに対して、バレー2、2' および 3、3'は横有効質量  $m_t$  で閉じ込められる。それぞれの有効質量の値は  $m_l = 0.98m_0$  と  $m_t = 0.19m_0$  で与えられるので、重い縦有効質量を持つバレー1、1'が基底サブバンドを構成する。バレー1、1'は同じサブバンド準位を持つことから、これらを **2 重縮退バレー**(2-fold valleys)、同様にバレー2、2'と 3、3'を **4 重縮退バレー**(4-fold valleys)とよんでいる。各縮退バレー(基底準位)の波動関数とサブバンドエネルギーの大小関係を模式的に図 5.20(b)に示す。2 重縮退バレーは、電流方向に軽い有効質量  $m_t$  を持つため高移動度特性が得られることに加え、閉じ込め方向には重い有効質量を持つため薄い反転層が形成され反転層容量の影響が低減される。

このように MOSFET の性能を向上させるには、2 重縮退バレーにできるだけ多くの電子を分布させる工夫を施せばよい。従来のバルク構造の MOSFET では、2 重/4 重縮退バレー間のエネルギー差が熱エネルギーに比べて十分に大きく取れないため(付録 B 参照)、状態密度の大きな 4 重縮退バレーにも相当数の電子が分布してしまう。そこでサブバンド構造を人工的に変調し 2 重縮退バレーに優先的に電子を分布させる方法として 2 通りのアプローチが提案されている。一つはひずみを印加すること、もう一つは超薄膜 SOI 構造を導入することである。その概念図を図 5.21 に示す[5]。

### ひずみ Si

上で述べたとおり、通常バルク構造では、室温の場合、移動度の低い 4 重縮退バレーにも相当数の電子が分布してしまう。そこで MOS 界面に平行方向に引っ張りひずみ、あるいは垂直方向に圧縮ひずみを印加すると(2 軸性ひずみ)、バルクで 6 重縮退していた伝導帯最下端のエネルギーが分裂して、2 重縮退バレーのバンド端が 4 重縮退バレーのそれよりも低下し、その結果として、2 重縮退バレーと 4 重縮退バレーの基底サブバンドエネルギー差が広がることになる。このエネルギー分裂の増大は、次の 2 つの機構により移動度増大をもたらす。一つは、移動度の高い 2 重縮退バレーの電子占有率が增大することによる平均移動度の増大である。もう一つは、2 重縮退バレーと 4 重縮退バレー間のバレー間フォノン散乱の抑制である。基底サブバンドエネルギー差がバレー間散乱を引き起こすフォノンのエネルギーよりも大きくなれば、電子の遷移先がなくなるため散乱が抑制されることになる。

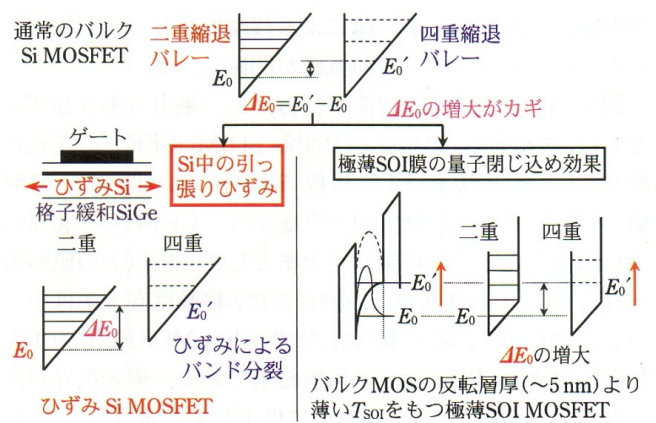


図 5.21 Si(100)面反転層の電子サブバンド構造エンジニアリング[16].

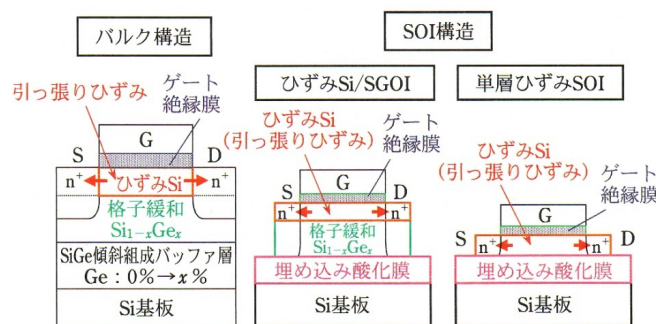


図 5.22 2 軸引っ張りひずみを用いたひずみ Si MOSEFT[16].

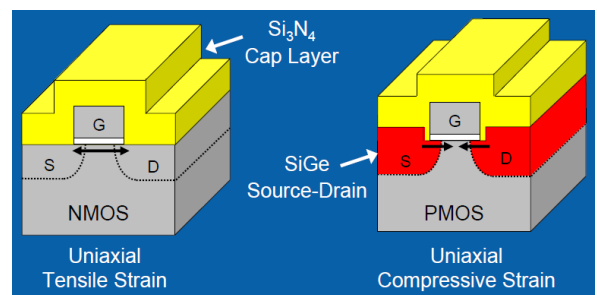


図 5.23 1 軸引っ張りひずみを用いたひずみ Si MOSEFT.

(\*) 現在の LSI は Si (100)面を MOS チャネルの界面にして製造されている。(100)面は他の面に比べて表面のダングリングボンド密度が少なく、MOS 界面に形成される欠陥やトラップ準位の密度を低くできることが主な理由である。

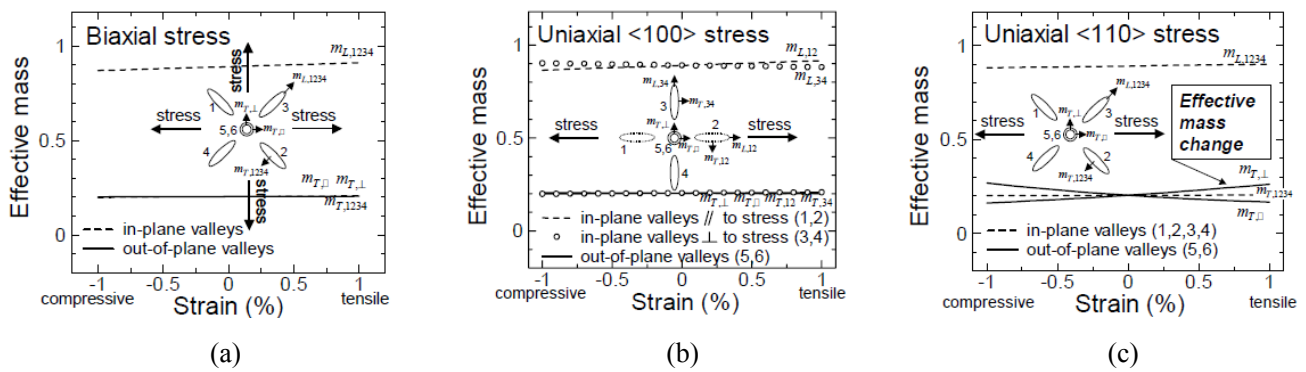


図 5.24 ひずみによる電子有効質量の変化[17].

2 軸性引っ張りひずみを用いた MOSFET の素子構造例を図 5.22 に示す。Si よりも格子定数の大きな SiGe 層の上に Si チャネルを堆積することで、MOS 界面に平行な 2 方向に引っ張りひずみが導入される仕組みになっている。一方、ひずみを上記と逆方向 (MOS 界面平行方向に圧縮あるいは垂直方向に引っ張りひずみ) に印加すれば、電子移動度は低下する傾向を示す。これには、移動度の低い 4 重縮退バレーの占有率増大が主に効いていると考えることができる。

以上は 2 軸性引っ張りひずみによる電子移動度向上技術であるが、最近 1 軸性引っ張りひずみによる電子移動度の大幅な向上が報告され注目を集めている。1 軸性ひずみを用いた MOSFET の素子構造例を図 5.23 に示す。Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> Cap 層が素子全体をチャネル方向に引っ張る構造となっており、ひずみの導入が簡単です。Intel が出荷する CPU で実用化されている。ただしこの手法では印加できるひずみ量が小さいため、より大きな 1 軸性ひずみが印加できるようにソース・ドレイン電極に Si と異なる格子定数をもつ材料を導入し、チャネルをソース・ドレイン方向に直接引っ張り、あるいは圧縮する方法が研究されている。1 軸性ひずみの 2 軸性ひずみとの違いは、図 5.24 に示すように <110>チャネル方向の電子の有効質量が小さくなる点である[17,18]。すなわち、1 軸性<110>引っ張りひずみを印加した場合は、上述した 2 重縮退・4 重縮退バレー間の基底サブバンドエネルギー差の増大に加えて、基底 2 重縮退バレーのチャネル方向の有効質量が軽くなるため、2 軸性ひずみよりも更なる移動度向上が期待できる。

n-MOSFET と比較して、ひずみが p-MOSFET の正孔移動度に与える影響は複雑であり、よく理解されていない点が多い。p-MOSFET の移動度を高めるのに有効なひずみは、電流方向に平行な 1 軸圧縮ひずみ、および 2 軸引っ張りひずみであることが指摘されているが、価電子帯サブバンド構造はきわめて複雑であり様々な解釈も提案されていて、今後さらに実験・理論の両面から MOS 界面の正孔輸送特性とサブバンド構造を明らかにしていく必要がある [16]。

### 超薄膜 SOI 構造

n-MOSFET の 2 重縮退・4 重縮退バレー間の基底サブバンドエネルギー差の増大は、量子閉じ込め効果を利用することでも実現することができる。図 5.21 右図に示すように、バルク MOS の反転層厚より薄い厚さの SOI 層に電子を閉じ込めることによって、4 重縮退バレーのサブバンドエネルギーのみを上昇させ、2 重縮退バレーとのエネルギー差を拡げることができる。フォノン散乱で決まる電子移動度の SOI 膜厚依存性の計算結果[19]を図 5.25(a)に、実験結果[20]を

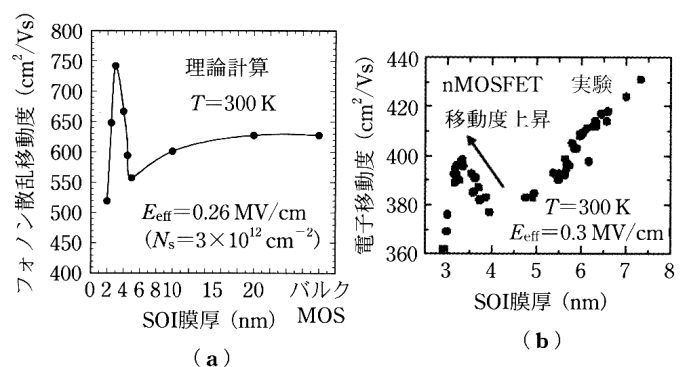


図 5.25 極薄 SOI の移動度と SOI 膜厚の関係. (a)計算結果 [19]、(b)実験結果[20].

同図(b)に示す。SOI 膜厚が 3~4nm 付近で、実験結果、計算結果ともに移動度が最大値をとることが分かる。このように移動度が単調増加せず最大値をとる理由は、2 重縮退バレーの電子占有率の増加による移動度向上効果と、反転層厚の減少に伴うフォノン散乱確率の増加がトレードオフの関係にあることによる。一方、実験で得られたピーク移動度の値は計算値よりも低く、また SOI 膜厚の減少とともに移動度全体が減少する傾向を示している。これは図 5.26 に示すように、SOI 膜厚の空間的な変動の結果として生じたサブバンドエネルギーの空間的ゆらぎによる散乱が原因である[20]。このため SOI 層薄層化による移動度向上効果を楽しむためには、SOI 膜厚のゆらぎを極めて小さく抑えることが不可欠になる。

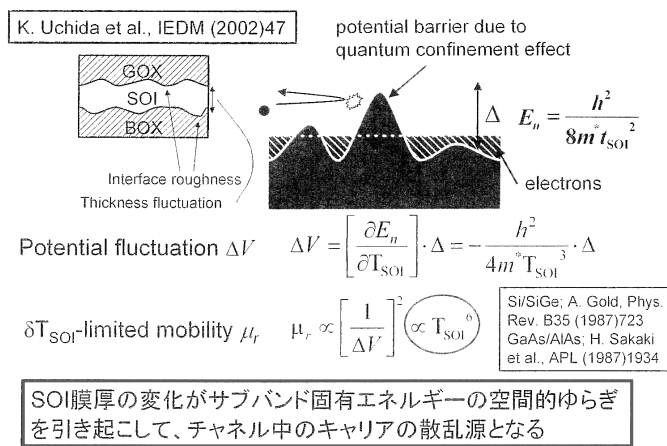


図 5.26 極薄 SOI 固有の新散乱機構～膜厚ゆらぎ散乱。

### 5.5.2 高移動度チャネル MOSFET (Ge/III-V 族チャネル/カーボンナノチューブ/グラフェン)

⇒  $I_{ON}$  の増大(高速化、低電圧化) etc.

ひずみ技術に続くブースター技術として、Ge や III-V 族化合物半導体あるいはカーボンナノチューブやグラフェンなどの高移動度チャネルを用いた MOSFET が注目されている。表 5.3 に、代表的な半導体の移動度や有効質量の値を示す[3]。Ge は、Si より電子・正孔移動度が高く、有効質量も軽い。特に、正孔移動度(有効質量)は他の半導体と比較して最も高く(軽く)、p-MOSFET への応用に最適である。一方、III-V 族化合物半導体は、高い電子移動度と軽い電子有効質量から、n-MOSFET への応用が有望である。

このように III-V 族化合物半導体は、電子の有効質量が軽いという特徴から、電子の速度が高まることや、散乱確率が減り(4 章の状態密度の式(4.18)、(4.22)、(4.24)参照)バリスティック伝導性が高まることで有利であると期待される。しかしその反面、有効質量が小さいために状態密度が減り十分な反転層キャリア数を得るためには、フェルミ準位をより大きく動かす必要がでてくる。これはゲート電圧をより大きく動かす必要があることを意味しており、その結果、相互コンダクタンスが低下したり低電圧化の障害になる可能性がある[21-23]。また、バリスティック状態に近づくと、ソースからドレインに向かう運動量をもったキャリアがソース領域内から供給されにくくなり(source starvation)、電流増大を妨げるという指摘もある[21,22,24]。さらに、有効質量の小さい半導体ではバンドギャップが小さくなる傾向があり、バンド間トンネルによるリーク電流の増大が懸念されている。以上のことから有効質量は軽ければよいというわけではなく、応用先を含めて総合的に判断する必要がある。

表 5.3 主要半導体の材料物性表[3].

	Si	Ge	GaAs	InP	InAs	InSb
電子移動度 (cm <sup>2</sup> /(V·s))	1,600	3,900	9,200	5,400	40,000	77,000
電子有効質量 ( $m_0$ )	$m_t$ : 0.19 $m_l$ : 0.916	$m_t$ : 0.082 $m_l$ : 1.467	0.067	0.082	0.023	0.014
正孔移動度 (cm <sup>2</sup> /(V·s))	430	1,900	400	200	500	850
正孔有効質量 ( $m_0$ )	$m_{HH}$ : 0.49 $m_{LH}$ : 0.16	$m_{HH}$ : 0.28 $m_{LH}$ : 0.044	$m_{HH}$ : 0.45 $m_{LH}$ : 0.082	$m_{HH}$ : 0.45 $m_{LH}$ : 0.12	$m_{HH}$ : 0.57 $m_{LH}$ : 0.35	$m_{HH}$ : 0.44 $m_{LH}$ : 0.016
禁制帯幅 (eV)	1.12	0.66	1.42	1.34	0.36	0.17

$m_t$ : 横方向有効質量  $m_l$ : 縦方向有効質量  $m_{HH}, m_{LH}$ : 重い正孔, 軽い正孔の有効質量

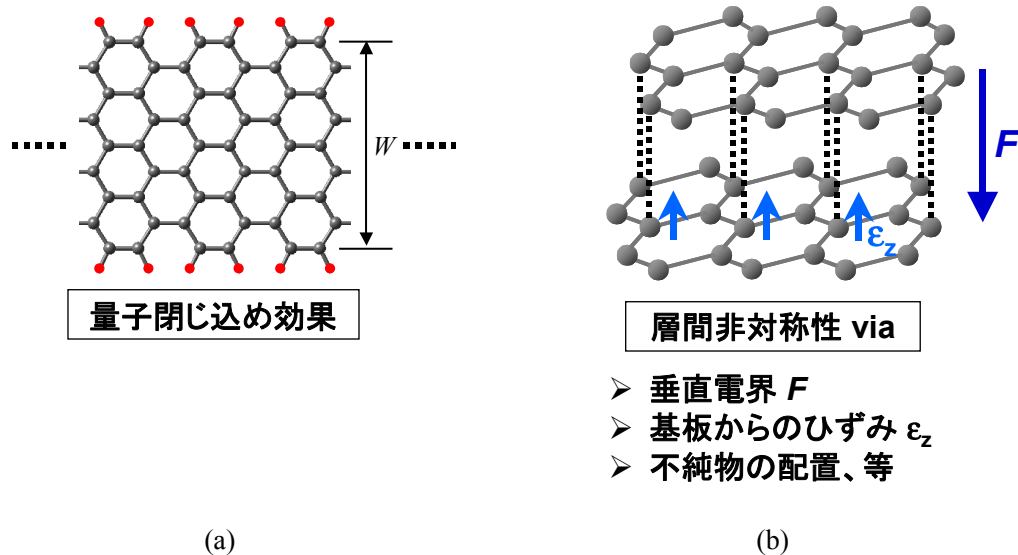


図 5.27 グラフェンにバンドギャップを発生させる方法. (a)グラフェンナノリボン、(b)バイレイヤグラフェン.

カーボンナノチューブやグラフェン (graphene) という炭素系チャネル材料 (carbon-based channel materials) も期待されている。グラフェンは炭素原子が六角形の構造を規則正しく平面上に繰り返して形成される原子シートである [25]。究極の 2 次元薄膜構造をしていることから、現在の CMOS プレーナ製造技術との親和性が高いと考えられている。また、グラフェン中の電子の移動度は  $200,000\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$  という Si の約 200 倍近い高移動度を示すことが実験的に示されており [26]、FET チャネルへの応用が期待される。しかしグラフェンはバンドギャップがゼロの半金属であるため、Si MOSFET のような電圧制御による電流オフ状態を実現することができない。このため LSI のスイッチ素子として使うことには無理がある。そこで、グラフェンにバンドギャップを発生させる方法がいくつか提案されている。一つはグラフェンをリボン構造にしたグラフェンナノリボン構造 (graphene nanoribbon) [27,28]と、2 つ目はバイレイヤ(2 層)グラフェン (bilayer graphene) [29-31]を用いる方法である。図 5.27 にそれらの原子構造を示す。グラフェンナノリボンでは、リボン構造による量子閉じ込め効果によりバンドギャップが発生する [32]。一方、バイレイヤグラフェンでは、垂直方向に電界を印加することや [29]、あるいは基板からのひずみや不純物の配置による層間非対称を導入すること [30,31]で、数百 meV のバンドギャップが開くことが分かっている。しかしバンドギャップが開くことにより、グラフェン特有の直線性の分散曲線が半導体と同様の放物線に変化したり [32,33]、さらにバイレイヤグラフェンでは有効質量が負になる Mexican hat 構造が見れるなど [33-36]、解決すべき課題が多く残されている。

### 5.5.3 マルチゲート構造 ⇒ 短チャネル効果抑制、ばらつかないトランジスタ etc.

短チャネル効果の抑制や「ばらつかないトランジスタ」を実現できる素子構造として、Fin FET やナノワイヤトランジスタ等のマルチゲート構造が有望視されている [37]。図 5.28 に代表的なマルチゲート構造である (a)ダブルゲート構造と (b)Fin 構造を示している。構造の提案としてはダブルゲート構造の方がかなり先ではあったが、図 5.28(b)で Fin (ヒレ)

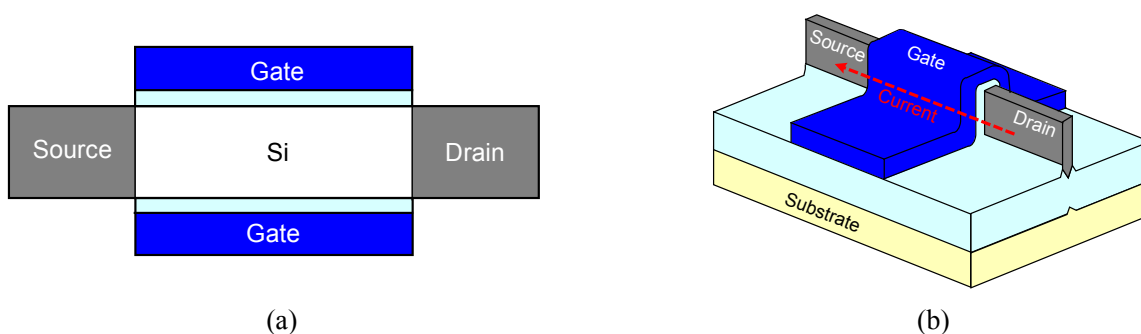


図 5.28 マルチゲート構造 MOSFET. (a)ダブルゲート構造、(b)Fin 構造.

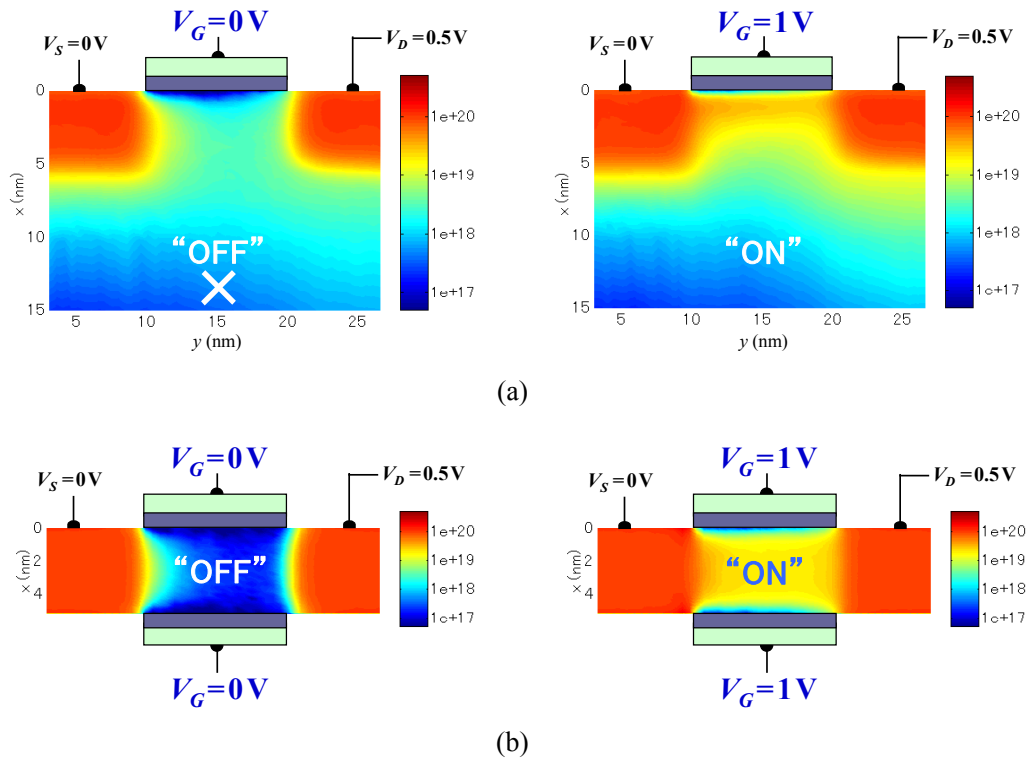


図 5.29 (a)バルク構造 MOSFET と(b)ダブルゲート構造 MOSFET のオン/オフ特性(電子密度分布).  $L_G = 10\text{nm}$ .

の高さを低くするとトリプルゲートとして作用することや、実際の作製が比較的容易であるという点から、最近では Fin FET の研究が進んでいる。

図 5.29 にダブルゲート構造を用いた場合の短チャネル効果の抑制効果をモンテカルロシミュレーションで実証した例を示す。図 5.29(a)はチャネル長 10nm のバルク構造 MOSFET でオン/オフ動作時の電子密度分布を示している。赤い程電子密度が高く、青いと電子密度が低いことを表している。オフ時にも関わらずチャネル内に電子が存在しており、短チャネル効果によりサブスレッショルド特性が劣化することが確認できる。一方、同図(b)に示したダブルゲート構造では、ゲートの支配力が増し良好なオフ状態が実現されている。

Fin FET の微細化が進んでいくと、その究極形状はナノワイヤ MOSFET となる。ナノワイヤ MOSFET の概念図を図 5.30 に示す。ナノワイヤ MOSFET ではゲートが周囲を囲むゲートオールアラウンド (Gate-All-Around) 構造をしているため短チャネル効果に強く、10nm 以下のゲート長でも正常に動作するトランジスタの実現が期待できる[38]。このとき、チャネル断面に存在する原子数は数えられる程度にまで減少することから、原子 1 個 1 個の特性がデバイス特性に顔を出すようになる。このため従来の有効質量近似の枠組みを超えた第一原理的な取り扱いが不可欠になる[39]。

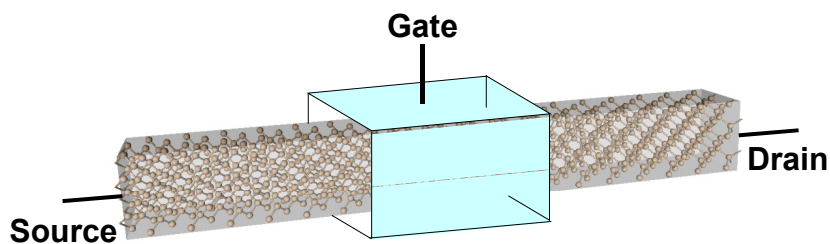


図 5.30 ナノワイヤ MOSFET の概念図.



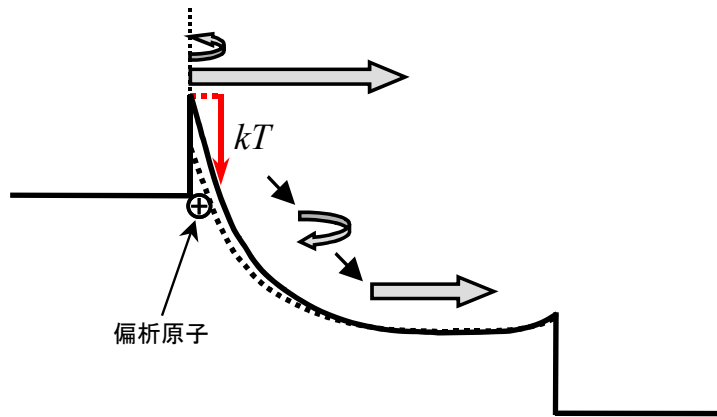


図 5.31 ショットキーMOSFET のポテンシャル分布.

#### 5.5.4 ショットキーMOSFET ⇒ ばらつき抑制、寄生抵抗低減、バリスティック促進( $I_{ON}$ の増大) etc.

微細化の進展に伴い、ソース・ドレイン電極の寄生抵抗がデバイス性能向上の障害となる可能性が出てきた。ソース・ドレイン接合深さ $x_j$ も短チャネル効果の抑制のためにどんどん薄くなっており、その寄生抵抗の増大が無視できなくなってきたためである。また、ひずみ Si や III-V 族チャネル等の高移動度チャネルでは、チャネル抵抗をできる限り低下させる構造となるため、電極の寄生抵抗が顕在化する恐れがある。寄生抵抗を低減するには、ソース・ドレイン電極のキャリア密度を高くすれば良いが、Si 中の固溶限界の制限があり、たとえばボロンでは $2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ といわれている[23,24]。今後さらに微細化された MOSFET では、このキャリア密度では不十分であり、本格的に寄生抵抗を下げるために、ソース・ドレイン電極に金属を採用する研究が始まっている。

金属と半導体を接触させた場合、5.2節で述べたように、ショットキー接触とオーミック接触の2通りが考えられる。良好なオフ特性を得るためにはショットキー接触の方が好ましいが、逆にオン状態ではショットキーバリアをトンネルして電流が流れるため、従来の pn 接合型 MOSFET に比べて駆動力が劣ってしまう。そこで、ソースからの不純物偏析現象を利用して、トンネルバリアを低くし電流駆動力を向上させる DSS-MOSFET (Dopant-Segregated-Schottky MOSFET)が提案されている[40]。図 5.31 にショットキーMOSFET のチャネル方向のポテンシャル分布を模式的に示す。ソース/チャネル界面に急峻なショットキーバリアが形成されるが、偏析不純物と鏡像効果によりバリア高さが変動されオン状態の電流増大が期待されている。

一方、バリスティック輸送の観点で見た場合、ショットキーバリアの形状は従来の pn 接合型に比べて狭い  $kT$  レイヤを持っている。したがって、pn 接合型に比べて小さな後方散乱確率を持つと予想されており、バリスティック MOSFET を実現する素子構造としても注目されている[41,42]。

### 5.6 新原理・新概念トランジスタ

5.3で述べたように電源電圧のスケールリングが停滞しているために、LSIの消費電力の増大がますます深刻になってきた。LSIの低電圧化を阻む要因の一つが、従来型 MOSFETではサブスレッショルド特性がスケールリングできない点になる。現在の MOSFETは、ゲートに電圧を加え半導体表面にキャリアの反転層(チャネル)を形成することで、ソースからドレインに流れる電流を制御している。このときソースからチャネルに注入されるキャリア数は熱放出過程で支配されるため、サブスレッショルド領域で

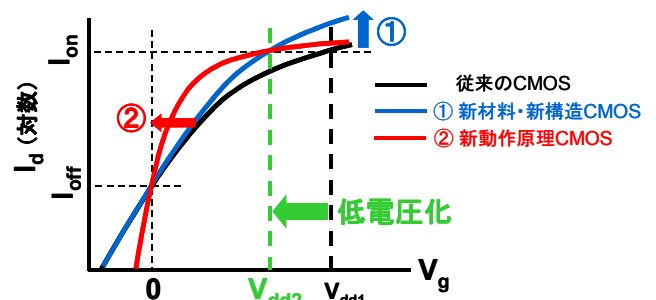


図 5.32 低電圧駆動 MOS トランジスタ.

の電流変化の急峻さを表すサブスレッショルド係数(S 値)には下限が存在し、室温では約 60mV/dec となる(5.2 参照)。上記の動作原理を使う限りは、S 値はこの下限値を下回することはできず(すなわちスケールリングできない)、このことがMOSFETの低電圧化や低消費電力化を妨げる大きな要因となっている。そこで、上記とは異なる新しい原理を用いることで、この限界値を破る研究が最近活発になってきた(図 5.32)。その代表的なデバイスは、トンネル効果を利用したトンネル FET とインパクトイオン化を利用した I-MOS である。いずれのデバイスも、オン電流が小さい、しきい値電圧の調整が難しいなどの問題を抱えているが、低消費電力動作のための研究が進められている。

### 5.6.1 トンネル FET

トンネル FET の構造と動作原理を図 5.33 に示す。トンネル FET では通常の MOSFET と異なり、ソースが p 型半導体でドレインが n 型半導体で構成される。図 5.33(b)に示すように、ゲートに電圧を加えると、ソースの価電子帯からチャンネルの伝導帯にトンネリング(Band to Band Tunneling:BTBT)によって電子が注入されるため電流が流れる。トンネル電流のオン・オフの切り替えは、熱放出過程よりも急峻に行うことができるため、室温においても 60mV/dec を下回る FET が実現できる。これまでに、カーボンナノチューブ[43]やシリコン[44]を用いたデバイスで、サブ 60mV/dec の FET 動作が実証されている。しかし、トンネル FET は従来の MOSFET に比べてオン電流が低くなるのが大きな課題の一つとして残っている。オン電流を向上させるには、トンネル確率を大きくする必要があるので、バンドギャップの小さな材料を用いることが有力な解決策の一つと考えられている。

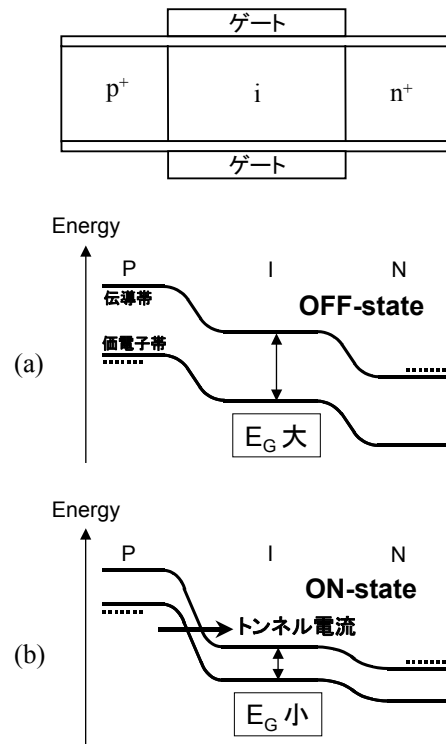


図 5.33 トンネル FET の構造と動作原理。(a)OFF 状態と(b)ON 状態のポテンシャル分布。

### 5.6.2 I-MOS (インパクトイオン化 MOS)

I-MOS はインパクトイオン化によるアバランシェ降伏を発生させ、60mV/dec より急峻な S 値を得るトランジスタである。その構造を図 5.34 に示す[45-47]。I-MOS もトンネル FET と同様にソースが p 型半導体でドレインが n 型半導体で構成される。ただし、ソース側の i 層の一部領域にゲート電極が覆われていない部分がある点がトンネル FET と大きく異なる点である。この領域に高電界を発生させインパクトイオン化を引き起こさせる。したがってサブスレッショルド電流は拡散電流ではなくインパクトイオン化電流が支配的となり、これまでに 50mV で 5.3 桁の非常に急峻な電流変化が報告されている[46,47]。ただし、シリコンはインパクトイオン化係数が小さいためドレイン電圧を高く設定する(～20V)必要がある。そのためインパクトイオン化係数の大きいゲルマニウムを用いた I-MOS も研究されている。

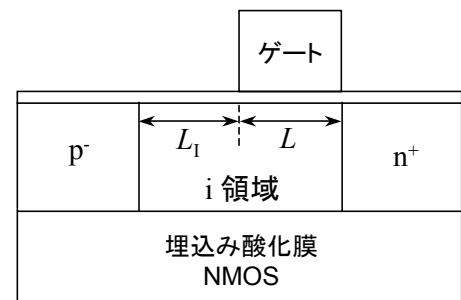


図 5.34 I-MOS のデバイス構造。

### 5.6.3 ジャンクションレストランジスタ

5.4.1 で述べたように短チャネル効果を抑制するには空乏層幅  $x_d$  を小さくすることが効果的であるが、微細化とともに、ソース/チャンネル間pn接合およびドレイン/チャンネル間pn接合を形成するドナーとアクセプター不純物の空間分布広がり問題となってきた。ナノスケールの MOS トランジスタでは、不純物分布の急峻性を nm オーダーで制御

することが求められてくるが、微細化とともに、この精密制御が非常に難しくなっている。そこで逆転の発想として、pn 接合を用いないトランジスタが提案された [48,49]。これをジャンクションレストランジスタ (junctionless transistor) と呼んでいる。これは、ソース・チャンネル・ドレインすべての領域を同一の極性を持つ半導体 ( $n^+$ -Si だけ、あるいは  $p^+$ -Si だけ) で構成するというものである。したがって OFF 状態を実現するには、Gate-All-Around 構造等のゲート静電制御力の極めて高いデバイス構造が必須となるため、図 5.35 に示すような FinFET やナノワイヤ FET と組み合わせた研究が主流となっている [50]。

さらに興味深い点として、ジャンクションレストランジスタは製造が容易になるという利点だけでなく、ON 電流が Si のバルク移動度 (電子の場合:  $\sim 1400\text{cm}^2/\text{Vs}$ ) で流れるようになるため、従来型 MOSFET の反転層移動度 (電子の場合:  $500 \sim 600\text{cm}^2/\text{Vs}$ . 付録 A 参照) に比べると高い電流駆動力を期待することができる。その一方で、チャンネル領域に多量の不純物が存在するため不純物散乱による移動度の低下や不純物ばらつきの問題が指摘されている。さらに、しきい値電圧が負になるなどの課題も残っており、適切な仕事関数を持つメタルゲート電極の選択等、精力的な検討が進められている。

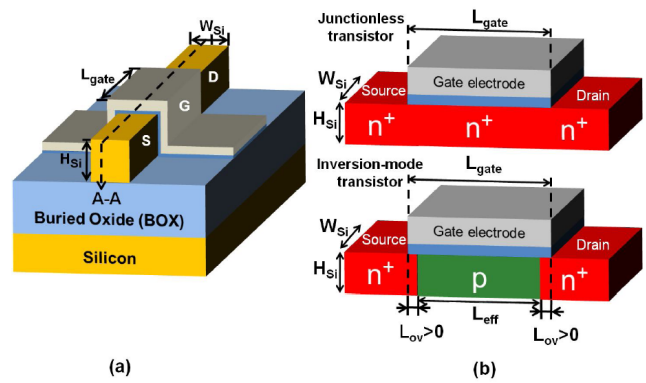
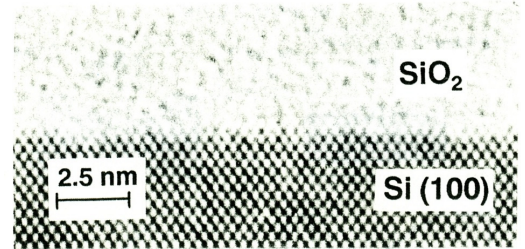


図 5.35 ジャンクションレストランジスタ (JLT) のデバイス構造 [50].

## 付録 A: 移動度ユニバーサル曲線

5.2 で述べたように、長チャネル MOSFET のオン電流は式(5.1)で与えられる。微細化による性能向上が難しくなってきたポストスケーリング世代では、チャネルのキャリア移動度  $\mu$  を増大させるひずみ Si や Ge、さらには III-V 族半導体等の高移動度チャネル材料の導入に大きな期待が寄せられている。移動度の定義はキャリア速度  $v$  と電界  $E$  を用いて  $v = \mu E$  と与えられ、半導体のキャリア輸送に関する物理的性質が押し込まれている。MOS 反転層の移動度は、Si/SiO<sub>2</sub> 界面やゲート電極などの影響を受けてバルクの移動度とは異なる性質を示す。たとえば、オン状態では反転層キャリアは量子化され状態密度や散乱確率の変化が起こる。また図 A.1 に示すように SiO<sub>2</sub> 界面は完全に平坦ではなく原子レベルの凹凸が存在し、キャリアはこの凹凸により散乱され移動度の低下が生じる[51]。これをラフネス散乱とよんでいる。さらに基板内に分布する不純物や界面電荷、SiO<sub>2</sub> 中の捕獲電荷などによるクーロン散乱も存在する。そしてこれらの影響は、ゲート電圧の有無、つまりトランジスタのオン/オフ状態で大きく異なってくる。このため、MOS 反転層の移動度はゲート電圧に依存することになり、その振る舞いを示す特性が移動度ユニバーサル曲線 (mobility universal curve) とよばれている。



- 原子層オーダーでの界面の凹凸が存在
- キャリアの波長オーダーの界面凹凸により散乱

図 A.1 MOS 界面のラフネス[51].

図 A.2 に(100)面の電子と正孔のユニバーサル曲線を示す[52]。横軸は実効電界 (effective field) とよばれ次式で定義される。

$$E_{eff} = \frac{q}{\epsilon_{Si} \epsilon_0} (N_{dpl} + \eta N_s) \quad (A.1)$$

$\epsilon_{Si}$  は Si の誘電率、 $N_{dpl}$  は空乏電荷密度、 $N_s$  は反転電荷密度を表す(図 A.3 参照)。ここで  $\eta$  は実験結果へのフィッティングパラメータであり、ユニバーサル曲線を議論する際のキー・パラメータとなる。 $\eta$  の値については S. Takagi らにより系統的に検討され、他の面方位も含めて表 A.1 にその値を示している[53]。このことから、移動度ユニバーサル曲線は経験的な特性であると考えられている。

図 A.2 の横軸の実効電界  $E_{eff}$  は界面の閉じ込め方向の電界であるので、MOSFET のゲート電圧に対応している。すなわち低  $E_{eff}$  領域がオフで、高  $E_{eff}$  領域がオンに対応する。スケーリングにより(⇒ 高基板不純物密度、SiO<sub>2</sub> 酸化膜薄層化)、界面の実効電界は大きくなる傾向にあるので(このため量子化の影響も重要になる)、オン電界は徐々に図 A.2 の右側の領域に移りつつある(図 A.4 参照)。したがって、スケーリングにより移動度が減少してしまい、MOSFET の電流駆動力が低下すると懸念されている。

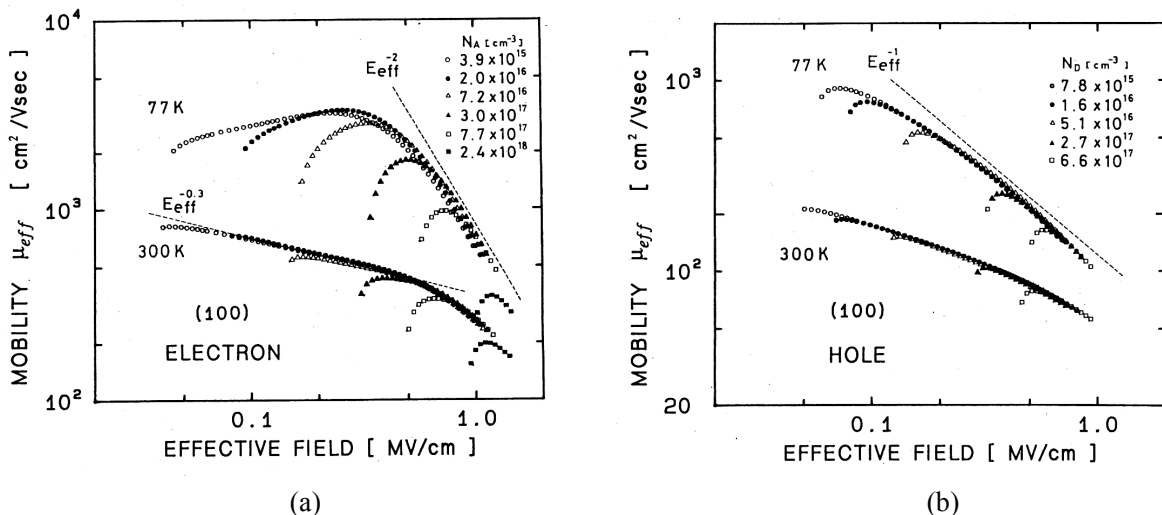


図 A.2 (a)電子と(b)正孔の移動度ユニバーサル曲線。(100)面 [52].

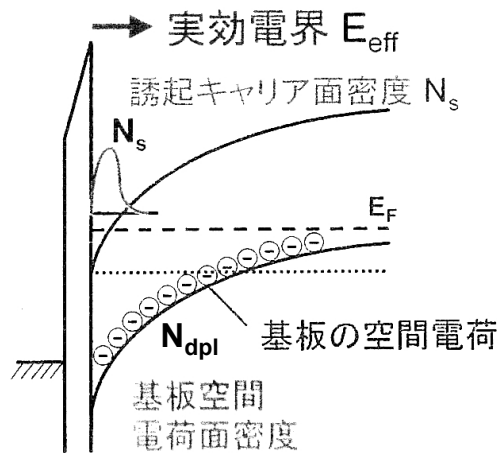


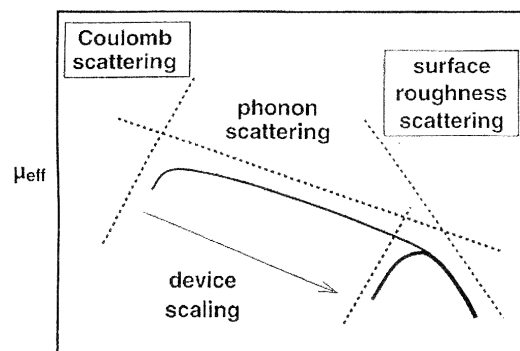
図 A.3 実効電界の意味[51].

表 A.1 パラメータ $\eta$ の値[53].

$\eta$	(100)面	(110)面	(111)面
電子	1/2	1/3	1/3
正孔	1/3	-	-

それでは次に、ユニバーサル曲線を支配するキャリアの散乱現象について述べることにする。図 A.4 に描かれているように、ユニバーサル曲線は次の 3 つの領域に分けて考えることができる。低  $E_{eff}$  領域では、基板不純物や界面電荷および  $\text{SiO}_2$  中の捕獲電荷等によるクーロン散乱が支配的となっており、このため  $N_s$  の増大によって遮蔽効果が働くため移動度は増大する。中  $E_{eff}$  領域ではフォノン散乱が支配的となり、 $E_{eff}$  の増大とともに反転層の量子閉じ込めが強くなることでフォノン散乱確率が増大するため移動度は減少する。またフォノン散乱が関係しているため、温度による差が顕著に出るのもこの領域の特徴である。最後に高  $E_{eff}$  領域では、キャリアが  $\text{SiO}_2$  界面に強く引き寄せられるため、ラフネス散乱が影響して移動度が急激に減少する。図 A.2(b)の正孔では電子と異なり高  $E_{eff}$  領域の傾きに大きな変化は見られないが、これは電子と正孔でラフネス散乱の影響の仕方が異なり、正孔では  $E_{eff}$  の広い範囲でラフネス散乱が影響するためと説明されている [52]。

5.5.1 で述べた通り、ひずみ Si 技術はチャネル層の Si に引張りひずみ、あるいは圧縮ひずみを加えることで、n-MOS、p-MOS ともに移動度を向上させることができる技術であり、最先端の LSI ではすでに実用化が始まっている。



MOS界面に垂直方向の実効電界  $E_{eff}$

図 A.4 反転層移動度を決定する散乱機構[51].

## 付録 B: 反転層キャリアの量子化

図 B.1 に示すように、MOS 界面の反転層はキャリアにとって(擬似三角形の)量子井戸構造になっており、スケーリングにより界面電界が大きくなるにしたがって、量子化の影響が顕在化してきた。量子化の影響を正確に評価するには、シュレディンガー方程式とポアソン方程式を自己無撞着に解析する必要があるが[54]、ここでは、簡単な近似を用いて量子化された反転層電子の性質を考えることにする。

図 B.1 を詳しく説明する。この図は n チャネル MOSFET に正のゲート電圧を印加した場合のゲート電極から p-Si 基板に向かってのポテンシャルエネルギー分布を示している。印加した電界によってゲート電極のエネルギーは下がり、絶縁膜との界面近傍の半導体表面は図のように曲げられ、その結果電子が伝導帯に誘起される。p-Si 基板に対して電子が誘起されるので、この電子の層を反転層とよぶ。価電子帯も同様に曲げられるから、界面近傍の正孔は p-Si 基板側へ押し出され、負に帯電したアクセプターが取り残される。この領域を空乏層とよび、その長さを  $x_d$  として表している。p-Si 基板の奥深く ( $x \rightarrow \infty$ ) では、正孔とアクセプターが同じ密度で存在し中性を保っている。そのフェルミエネルギーを  $E_f$  とする。

図 B.1 の反転層が形成される界面近傍の拡大図を図 B.2 に示す。このように反転層の電子は近似的に、三角形のポテンシャル井戸に閉じ込められていると考えてよい。この三角ポテンシャル井戸の幅が電子のド・ブロイ波長よりも短くなると、 $x$  方向の電子エネルギーは離散的な値を取るようになる(第 1 章 1.2.1 参照)。これをエネルギーの量子化とよぶ。一方、 $y$ 、 $z$  方向(界面に平行な面内)には電子は自由に動くことができる。このような電子を 2 次元電子ガスとよび、MOSFET の反転層電子は 2 次元電子状態を形成することがわかる。

三角ポテンシャル井戸に閉じ込められた電子の量子化エネルギーを、簡単な近似を用いて求めてみよう。図 B.2 の破線で示すように、界面近傍のポテンシャルを  $V(x) = eFx$  の直線で近似する。 $F$  は界面における印加電界を表し、今は簡単のため、ゲート電圧に比例すると考えることにする。さらに、三角ポテンシャルの外側への波動関数の染み出しを無視する。このとき電子の波長を  $\lambda$  とすると、三角ポテンシャル井戸にできる定在波の右端の位置は

$$x_n = n \frac{\lambda}{2} \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (\text{B.1})$$

となる。この位置でのポテンシャルエネルギーは  $eFx_n$  であり、これが  $x$  方向の電子の運動エネルギーと等しいと仮定する。つまり、電子の有効質量を  $m^*$ 、運動量を  $p_x$  として

$$E_x^n = \frac{p_x^2}{2m^*} = eFx_n \quad (\text{B.2})$$

と近似する。上式に、運動量と波長の間のド・ブロイの関係

$$p_x = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \quad (\text{B.3})$$

と、さらに式(B.1)を適用すると

$$\frac{1}{2m^*} \left( \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \right)^2 = eFx_n = eF \frac{n\lambda}{2}$$

となり、電子の波長は

$$\lambda = \left( \frac{4\pi^2\hbar^2}{nm^*eF} \right)^{1/3}$$

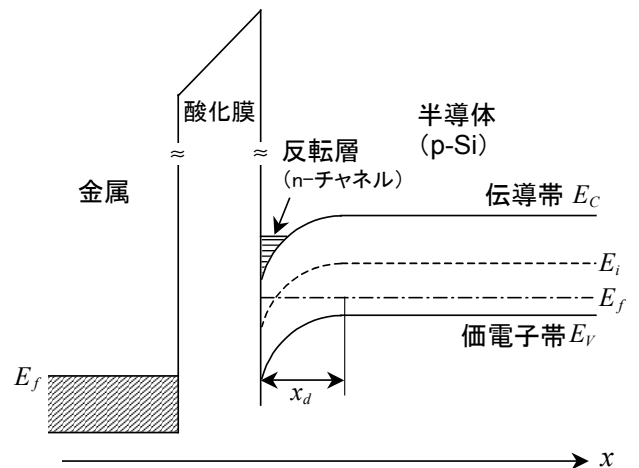


図 B.1 n チャネル MOSFET に正のゲート電圧を印加した場合のポテンシャルエネルギー分布。

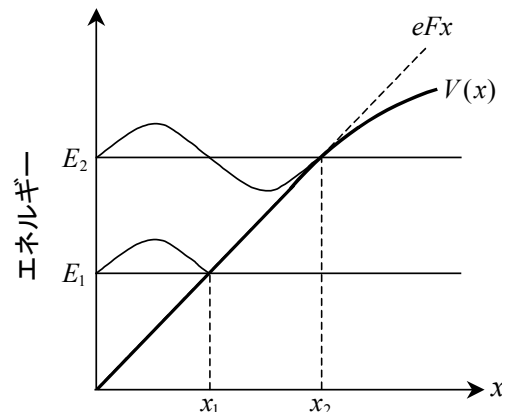


図 B.2 界面付近のポテンシャル分布と電子波。

(B.4)

と与えられる。したがって電子のエネルギー  $E_x^n$  は

$$E_x^n = eFx_n = eF \frac{n\lambda}{2} = \frac{neF}{2} \left( \frac{4\pi^2 \hbar^2}{nm^* eF} \right)^{1/3} \quad (B.5)$$

$$= \left( \frac{n^3 e^3 F^3}{8} \frac{4\pi^2 \hbar^2}{nm^* eF} \right)^{1/3} = \left( \frac{n^2 e^2 F^2}{2} \frac{\pi^2 \hbar^2}{m^*} \right)^{1/3} = \frac{1}{(2m^*)^{1/3}} (\pi \hbar eF)^{2/3} n^{2/3} \quad (n=1, 2, \dots)$$

と表すことができる。式(B.5)の結果は、三角ポテンシャル井戸に閉じ込められた電子波は表面電界  $F$  の  $2/3$  乗に比例し、有効質量  $m^*$  の  $1/3$  乗に反比例することを表している。

[変分法による近似的解法] 三角ポテンシャル近似した反転層電子のシュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \varphi_n}{dx^2} + eFx \varphi_n(x) = E_x^n \varphi_n(x) \quad (B.6)$$

を変分法を用いて解き、エネルギー固有値と固有関数を求めよ[55]。

### [1]基底準位 ( $n=1$ )

試行波動関数を

$$\psi_1(x) = K_1 x \exp\left(-\frac{c_1 x}{2}\right) \quad (B.7)$$

において、次のエネルギー期待値の最小条件と波動関数の規格化条件を用いて解( $K_1, c_1$ )を決定する。

$$E_x^1 = \int_0^\infty \psi_1^* H \psi_1 dx \rightarrow \min \quad (B.8)$$

$$1 = \int_0^\infty \psi_1^* \psi_1 dx \quad (B.9)$$

式(B.9)より

$$K_1 = \sqrt{\frac{c_1^3}{2}} \quad (B.10)$$

が得られ、これを用いてエネルギー期待値を計算すると

$$E_x^1 = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{c_1}{2} \right)^2 + \frac{3eF}{c_1} \quad (B.11)$$

と求まる。エネルギー期待値を最小にする条件、すなわち  $dE_x^1 / dc_1 = 0$  より

$$c_1 = \sqrt[3]{\frac{12m^* eF}{\hbar^2}} \quad (B.12)$$

となるので、これを式(B.11)に代入すると

$$E_x^1 = \frac{1}{(2m^*)^{1/3}} (\pi \hbar eF)^{2/3} \times 3 \times \underbrace{\left( \frac{3}{4\pi} \right)^{2/3}}_{1.15} \quad (B.13)$$

$$= 1.15 \times \frac{1}{(2m^*)^{1/3}} (\pi \hbar eF)^{2/3}$$

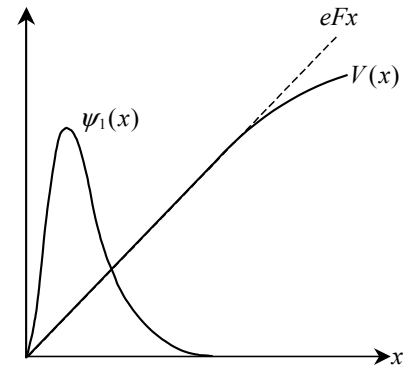


図 B.3 基底準位の波動関数の概形図.

が得られる。この結果は、先に求めた式(B.5)とかなり近い値となっていることがわかる。このように粗い近似を使って定性的に出した式(B.5)の結果が、変分法による精度の高い計算結果とよく一致することは注目に値する。

一方、波動関数は

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{6m^*eF}{\hbar^2}} x \exp\left(-\sqrt[3]{\frac{3m^*eF}{2\hbar^2}} x\right) \quad (\text{B.14})$$

と求められ、これを描くと図 B.3 のようになる。すなわち、界面で波動関数はゼロとなり、界面から離れた位置で最大値をとることが分かる。また式(B.14)を見ると、電界  $F$  を大きくする、すなわちゲート電圧を大きくすると波動関数の振幅が大きくなり、かつ界面から離れた位置での減衰が早くなる結果が導かれる。つまりゲート電圧を大きくすると、反転層への閉じ込めが強くなり電子はより界面に近い所に分布するようになる。また有効質量  $m^*$  についても同様であり、有効質量が重いほど電子は界面に近い所に分布することが分かる。

## [2]第一励起準位 ( $n=2$ )

第一励起準位の波動関数は、図 A.4 に示すように予想されるので、試行波動関数を次のように仮定する。

$$\psi_2(x) = K_2 (x + a_2 x^2) \exp\left(-\frac{c_2 x}{2}\right) \quad (\text{B.15})$$

励起準位の波動関数には、次の式(A.17)の規格化直交条件が課せられる。

$$E_x^2 = \int_0^\infty \psi_2^* H \psi_2 dx \rightarrow \min \quad (\text{B.16})$$

$$\delta_{mn} = \int_0^\infty \psi_m^* \psi_n dx \quad (\text{B.17})$$

ここで  $\delta_{mn}$  はクロネッカーの  $\delta$  である。励起準位の場合は、基底準位のように解析的な解を求めることができないため、一般的に計算機による数値計算が必要となってくる。

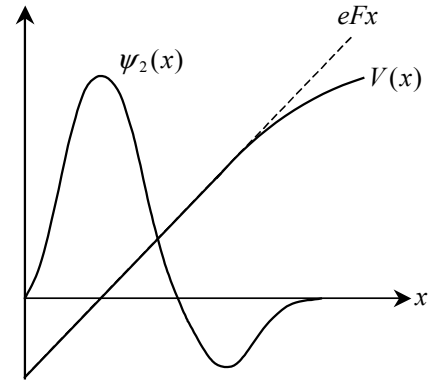


図 B.4 第一励起準位の波動関数の概形図。

[問題 B.1] 式(B.5)を用いて、Si 伝導帯の 2 重縮退バレーと 4 重縮退バレーの基底サブバンドエネルギー差を計算してみよ。有効質量の値は  $m_l = 0.98m_0$  と  $m_t = 0.19m_0$  とし、電界は  $F = 0.1 \sim 1.0 \text{ MV/cm}$  で適当な値を選択せよ(付録の図 A.2(a)参照)。



## 付録 C: 反転層容量

MOS キャパシタのゲート容量  $C_G$  は、MOS トランジスタの電流駆動力を支配する重要なデバイス・パラメータである(式(5.1)参照)。ここでは、ナノスケール MOS トランジスタのゲート容量の決定に重要な役割を果たす反転層容量  $C_{inv}$  について説明する[56]。  $C_{inv}$  は、図 C.1 の MOS キャパシタンス等価回路に示すように、酸化膜容量  $C_{ox}$  に直列に入ることになり、ゲート容量の低下、ひいては MOS トランジスタの電流駆動力(ドレイン飽和電流)の低下につながる要因となるため、特に、ナノスケールの MOS デバイス設計において重要となる。ここでは簡単化のため、ゲート空乏化によるゲート電極の容量  $C_{poly}$  は無視している。  $C_{inv}$  は、Si の有限の状態密度に起因する状態密度容量  $C_{inv}^{DOS}$  と、量子閉じ込め効果に起因する反転層厚容量  $C_{inv}^{thickness}$  からなる。まず、状態密度容量から説明を行う。

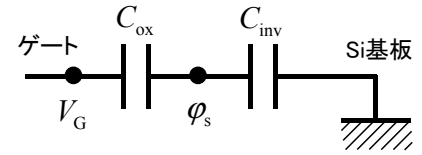
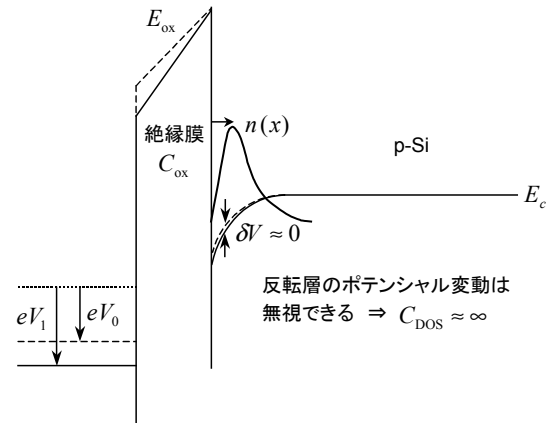


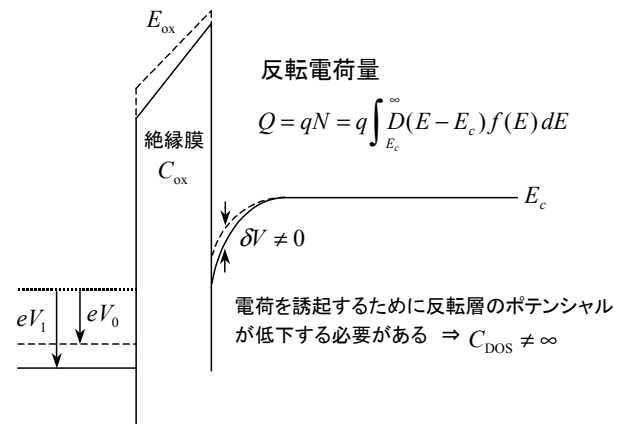
図 C.1 反転条件下での MOS キャパシタンスの等価回路。

図 C.2 に示すように、ゲート電極にしきい値電圧よりも大きな電圧を加えると、酸化膜界面に電子が誘起される(n-MOSFET の場合)。反転層の状態密度(DOS)が無限に大きい場合には、電圧を  $V_0$  から  $V_1$  に増やしても Si 基板側のポテンシャル変化はほとんど無視することができる。すなわち図 C.2(a)に示すように、  $V_0 \rightarrow V_1$  の電圧増加は酸化膜にかかる電界  $E_{ox}$  の増加に使われることになり、このためゲート容量  $C_G$  は、単純に酸化膜容量  $C_{ox}$  で与えることができる。



(a)反転層の状態密度(DOS)が無限に大きい場合

しかし実際の半導体では状態密度が有限であるため、界面に電子を誘起するには、図 C.2(b)に示すように、反転層のポテンシャルが低下する必要がある。その分だけ、酸化膜にかかる電界が減少するため、誘起される電荷量は  $Q = C_{ox}V$  よりも小さくなる。すなわち、付加的容量  $C_{inv}^{DOS}$  が  $C_{ox}$  に直列に接続され



(b)反転層の状態密度(DOS)が有限の場合

$$\frac{1}{C_G} = \frac{1}{C_{ox}} + \frac{1}{C_{inv}^{DOS}} \quad (C.1)$$

$$Q = C_G V < C_{ox} V \quad (C.2)$$

となるため、ゲート容量が低下する。この付加的容量  $C_{inv}^{DOS}$  を状態密度容量とよぶ(量子キャパシタンス[57]ともよばれる)。

$C_{inv}^{DOS}$  は状態密度が関係する容量であることから、キャリアの自由度に大きく依存することになる。4章で求めたように、3次元電子(バルク)、2次元電子(量子井戸)、1次元電子(量子細線)の状態密度は図 C.3 のような関係になる。したがって、有効質量の軽い材料(III-V 族半導体、グラフェン等)や極薄 SOI-MOSFET およびナノワイヤ MOSFET では、状態密度容量の影響が顕著になると予想される。状態密度容量を考慮するには、反転層電荷を量子力学的に計算するとともに、ゲート静電ポテンシャルとの自己無撞着計算を実行する必要がある。

図 C.2 MOS 反転層容量。

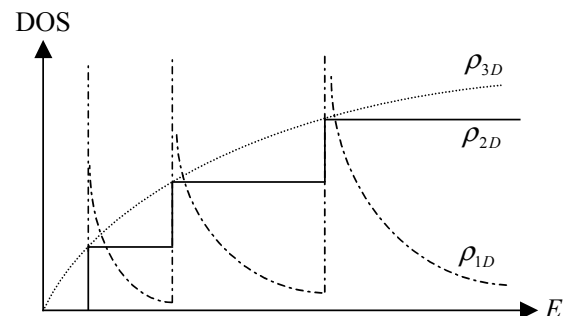


図 C.3 エネルギー状態密度の比較。

上記の議論では、反転層に誘起されるキャリアの空間分布までは考慮されていない。付録 B で述べたように、MOS の反転層に閉じ込められたキャリアの波動関数は、量子閉じ込め効果により酸化膜界面から離れた位置で最大となる。このことは、等価的(電氣的)な酸化膜厚を増加させることになる。この効果を付加的な容量  $C_{inv}^{thickness}$  が直列に接続された等価回路で表し、この  $C_{inv}^{thickness}$  を反転層厚容量とよぶ。結局、反転層容量  $C_{inv}$  は  $C_{inv}^{DOS}$  と  $C_{inv}^{thickness}$  の直列接続で

$$\frac{1}{C_{inv}} = \frac{1}{C_{inv}^{DOS}} + \frac{1}{C_{inv}^{thickness}} \quad (C.3)$$

と表され、このときゲート容量  $C_G$  は

$$\frac{1}{C_G} = \frac{1}{C_{ox}} + \frac{1}{C_{inv}} = \frac{1}{C_{ox}} + \frac{1}{C_{inv}^{DOS}} + \frac{1}{C_{inv}^{thickness}} \quad (C.4)$$

となる。反転条件下での  $C_{inv}^{DOS}$  と  $C_{inv}^{thickness}$  の役割については文献[56]で詳しく検討されており、その結果を図 C.4 で紹介する。反転電子密度  $N_s$  が小さい(低ゲート電圧)時には  $C_{inv}^{DOS}$  が支配的であり、逆に  $N_s$  が大きい(高ゲート電圧)時には  $C_{inv}^{thickness}$  が支配的であることが分かる。 $C_{inv}^{thickness}$  を考慮するには、閉じ込め方向のシュレディンガー方程式(あるいはコーン・シャム方程式)とポアソン方程式を自己無撞着に解き、キャリアの空間分布を正確に求める必要がある。

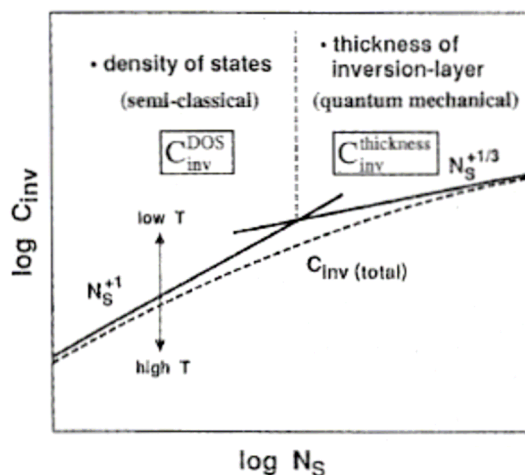


図 C.4  $C_{inv} - N_s$  特性[56].

## 付録 D: kT レイヤ理論

MOS のチャンネル内では、キャリアは様々な散乱を受けその一部はソースにまで戻され電流を減少させる。kT レイヤ理論は、等方性の弾性散乱(例、音響フォノン散乱)を考慮した場合に、以下のような定性的解釈により導き出すことができる[58]。

図 D.1 に示すように、MOSFET のオン状態ではボトルネックと呼ばれるポテンシャル頂上からキャリアが注入される。今、そこからポテンシャルエネルギーが熱エネルギー  $kT$  だけ下がった位置を考える。この領域を kT レイヤと呼ぶ。kT レイヤの端では、注入時に持っていた熱エネルギー  $kT$  と電界による加速分  $kT$  が加わり、合計で  $2kT$  の運動エネルギーを電子は持つことになる。ここでは 2 次元電子ガスを考えて電子の自由度は 2 にしている。この位置で等方性の弾性散乱(すなわち、すべての方向に等確率で、散乱前後のエネルギーが保存される散乱)が起こった場合、全エネルギー  $2kT$  が、自由運動する 2 方向に等分配されるため、チャンネル方向にはその半分の  $kT$  が残ることになる。ここで言うエネルギーは平均エネルギーであり、実際には熱広がりによって  $kT$  よりも大きなエネルギーを持つ電子が存在するため、後方散乱された電子の一部はソースへ戻ることが可能となる。

次にポテンシャルエネルギーが  $3kT$  下がった位置を考える。同様に考えると、今度は  $kT+3kT=4kT$  の運動エネルギーを持ち、それが弾性散乱で半分の  $2kT$  となりチャンネル方向に残ることになる。このときは熱広がりがあっても、後方に存在する  $3kT$  のバリアを越えることはできないため、この位置からソースへ戻ることが不可能となる。したがって、「チャンネルからソースへの後方散乱が可能となる領域は、およそソース端の kT レイヤ近傍に限られることになる」というのが kT レイヤ理論の考え方である。

**[問題 D.1]** 上記の考察を、3 次元電子と 1 次元電子にあてはめてみよ。特に、1 次元電子の場合、kT レイヤが存在するか考えてみよ。

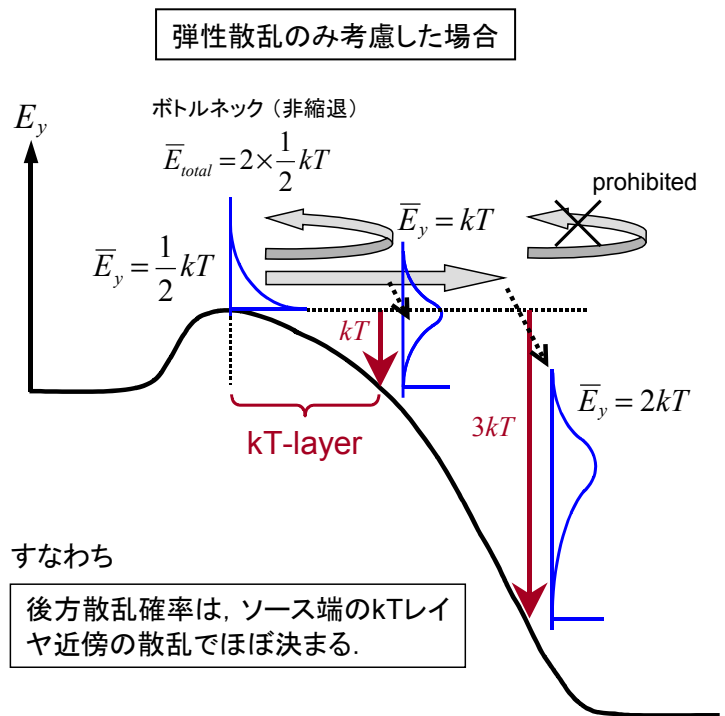


図 D.1 弾性散乱の役割(kT レイヤ理論).

## 付録 E: フラックス法による後方散乱確率の導出

付録 D で述べたように、kT レイヤ理論は後方散乱確率に寄与する散乱の範囲を定性的に与えている。この付録 E では McKelvey のフラックス法を用いて、後方散乱確率と kT レイヤの関係について理論的に導出する[59-61]。

McKelvey のフラックス法では、次の 3 つのルールをキャリアの運動に適用する。

1. 1次元上を右または左向きに走る
2. 速度の大きさは一定(熱速度  $v_t$ )
3. ランダムに後方散乱を受ける  
(平均自由工程  $\lambda$ )

このときのキャリアフラックスの動きのイメージを図 E.1 に示す。フラックス法を、図 E.2 に示す有限長の 1 次元導体に適用し、後方散乱確率  $R$  を与える理論式を以下で導出する。

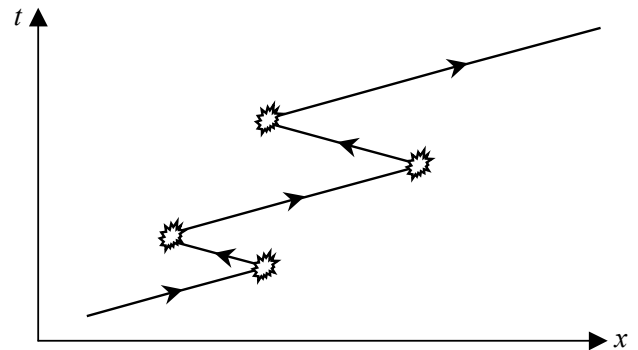


図 E.1 フラックスの動き.

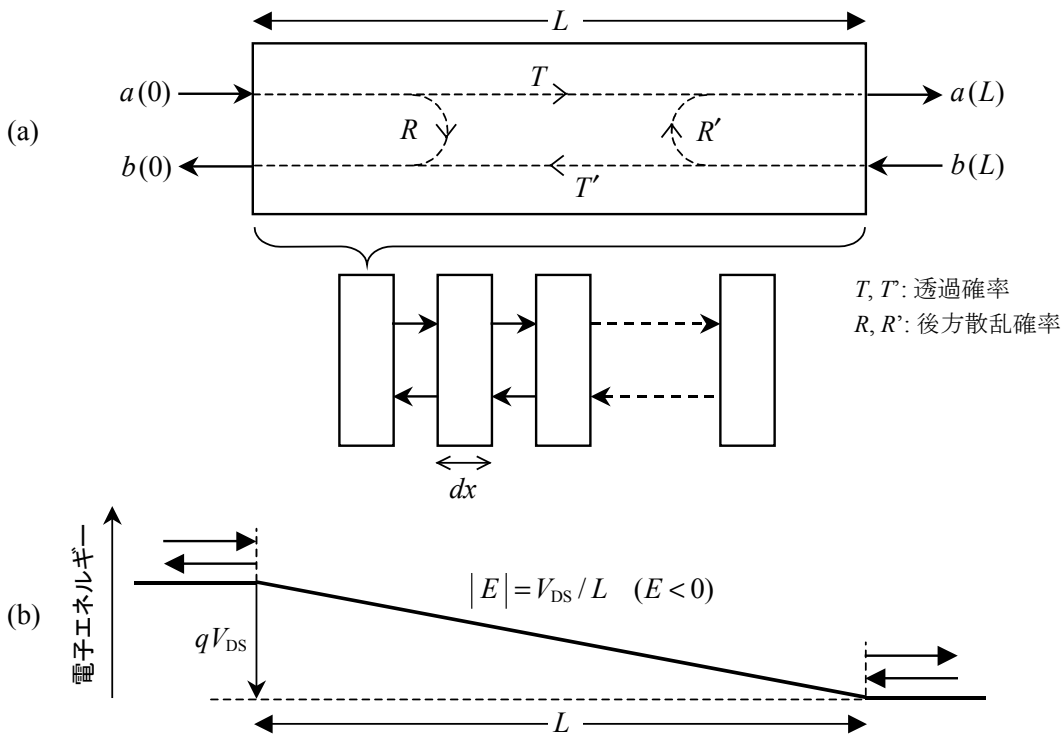


図 E.2 有限長の 1 次元導体中のフラックス伝導.

今、1 次元導体には図 E.2(b)に示すように、一定電界  $E (< 0)$  がかかっているとす。後方散乱確率  $R$  と透過確率  $T$  には

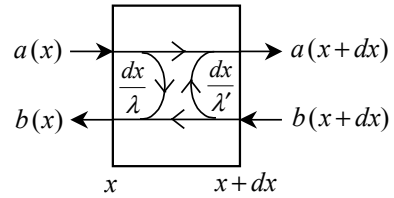
$$R = 1 - T \quad (\text{E.1})$$

の関係があるので、ここではまず透過確率  $T$  を求め、それから式 (E.1) の関係を使って後方散乱確率  $R$  を導出する方法をとる。したがって以下では、透過確率  $T$  を求めるために、右端と左端のフラックス  $a(L)$  と  $a(0)$  の関係を

$$a(L) = T \cdot a(0) + R' \cdot b(L) \quad (\text{E.2})$$

という形に表現することを行っている。ちなみに、ここで言うフラックスは電子密度の流れを意味し、電流密度と  $J = -q(a - b)$  の関係がある。

まず、各位置でのフラックスの透過と反射を記述するために、図 E.2(a)に示したように 1 次元導体を微小な要素の連結で構成する。その中の位置  $x$  での散乱行列を図 E.3 のように定義する。すなわち図 E.3 に示すように、位置  $x$  への入射フラックスを  $a(x)$ 、出射フラックスを  $b(x)$  とし、そこから  $dx$  進んだ位置  $x+dx$  での出射フラックスを  $a(x+dx)$ 、入射フラックスを  $b(x+dx)$  とすると、それら 4 つのフラックス間には、次の 2 つの関係が成り立つことが分かる。



散乱行列

$$\begin{bmatrix} a(x+dx) \\ b(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1-dx/\lambda & dx/\lambda' \\ dx/\lambda & 1-dx/\lambda' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a(x) \\ b(x+dx) \end{bmatrix}$$

図 E.3 散乱行列.

$$a(x+dx) = \left(1 - \frac{dx}{\lambda}\right)a(x) + \frac{dx}{\lambda'}b(x+dx) \quad (E.3)$$

$$b(x) = \frac{dx}{\lambda}a(x) + \left(1 - \frac{dx}{\lambda'}\right)b(x+dx) \quad (E.4)$$

ここで  $\lambda$  と  $\lambda'$  は、それぞれ左と右から入射したフラックスが  $dx$  進む間に後方散乱される平均自由行程を表す。電界がかかっている場合は、一般に  $\lambda \neq \lambda'$  となる。 $\lambda$  と  $\lambda'$  の関係については後述する。これら 2 式より、図 E.3 中に示す散乱行列が導かれる。

次に式(E.3)を使って、フラックス  $a$  に対する微分方程式を求める。式(E.3)より

$$a(x+dx) - a(x) = -\frac{dx}{\lambda}a(x) + \frac{dx}{\lambda'}b(x+dx) \quad (E.5)$$

となるので、この両辺を  $dx$  で割り、さらに  $dx \rightarrow 0$  (連続体近似) とすると次の微分方程式が得られる。

$$\frac{da}{dx} = -\frac{a}{\lambda} + \frac{b}{\lambda'} \quad (E.6)$$

同様に式(E.4)より、フラックス  $b$  に対する微分方程式が次のように導かれる。

$$\frac{db}{dx} = -\frac{a}{\lambda} + \frac{b}{\lambda'} \quad (E.7)$$

式(E.7)は後述するドリフト・拡散電流式との関係を議論する際に用いられる。ここで全フラックスを  $F = a - b$  と表すと、定常状態では電流連続の条件より  $F = a - b =$  位置に依らず一定 となる。これを式(E.6)に用いると

$$\frac{da}{dx} + \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)a = -\frac{F}{\lambda'} \quad (E.8)$$

となる。これが解くべき微分方程式である。その解を求めるために、まず式(E.8)の右辺をゼロとした式

$$\frac{da}{dx} + \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)a = 0 \quad (E.9)$$

の特殊解を求めておく。今、次のような解を仮定し

$$a(x) = Ae^{\beta x} \quad (E.10)$$

これを式(E.9)に代入すると

$$\beta = -\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right) \quad (E.11)$$

となる。したがって、式(E.8)の一般解を

$$a(x) = Ae^{-\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)x} + B \quad (E.12)$$

と表して、その係数  $A$  と  $B$  を以下で求めることにする。まず式(E.12)を式(E.8)に代入すると

$$-\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)Ae^{-\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)x} + \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)\left[Ae^{-\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)x} + B\right] = -\frac{F}{\lambda'}$$

より

$$B = -\frac{F}{\lambda'} \frac{\lambda \lambda'}{\lambda' - \lambda} = -\frac{\lambda}{\lambda' - \lambda} F \quad (\text{E.13})$$

が求められる。次に左端のフラックス  $a(0)$  を、式(E.12)と(E.13)を使って表すと

$$a(0) = A - \frac{\lambda}{\lambda' - \lambda} F \quad \Rightarrow \quad A = a(0) + \frac{\lambda}{\lambda' - \lambda} F \quad (\text{E.14})$$

となる。そこで式(E.13)と(E.14)を式(E.12)に代入すると、**フラックス  $a(x)$  は全フラックス  $F$  を用いた形で、次式のように表すことができる。**

$$a(x) = \left[ a(0) + \frac{\lambda}{\lambda' - \lambda} F \right] e^{-\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)x} - \frac{\lambda}{\lambda' - \lambda} F \quad (\text{E.15})$$

式(E.15)で  $x=L$  として右端のフラックス  $a(L)$  を表すと

$$a(L) = \left[ a(0) + \frac{\lambda}{\lambda' - \lambda} [a(L) - b(L)] \right] e^{-\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)L} - \frac{\lambda}{\lambda' - \lambda} [a(L) - b(L)] \quad (\text{E.16})$$

となる。ここで  $F(L) = a(L) - b(L)$  とした。上式を  $a(L)$  でまとめて整理すると

$$a(L) = \frac{1}{1 + \frac{\lambda}{\lambda' - \lambda} \left[ 1 - e^{-\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)L} \right]} \left\{ a(0) e^{-\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)L} + \frac{\lambda}{\lambda' - \lambda} \left[ 1 - e^{-\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)L} \right] b(L) \right\} \quad (\text{E.17})$$

$$= \frac{(\lambda' - \lambda) e^{-\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)L}}{\lambda' - \lambda e^{-\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)L}} a(0) + \frac{\lambda \left[ 1 - e^{-\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)L} \right]}{\lambda' - \lambda e^{-\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)L}} b(L)$$

となり、目的であった式(E.2)の表現が得られたことになる。したがって、透過確率は

$$T = \frac{(\lambda' - \lambda) e^{-\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)L}}{\lambda' - \lambda e^{-\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)L}} = \frac{(\lambda' - \lambda)}{\lambda' e^{\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)L} - \lambda} \quad (\text{E.18})$$

となることから、後方散乱確率は式(E.1)を用いて次のように求めることができる。

$$R = 1 - T = 1 - \frac{(\lambda' - \lambda)}{\lambda' e^{\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)L} - \lambda} = \frac{\lambda' e^{\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)L} - \lambda - \lambda' + \lambda}{\lambda' e^{\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)L} - \lambda} = \frac{\lambda' \left[ e^{\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)L} - 1 \right]}{\lambda' e^{\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right)L} - \lambda} \quad (\text{E.19})$$

ここで、平均自由行程  $\lambda$  と  $\lambda'$  の間に次の関係を仮定する。

$$\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} = -\frac{q|E|}{k_B T} \quad (\text{E.20})$$

ここで  $|E|$  は電界の大きさを表す。このように仮定すると後述するように、kT レイヤ理論からドリフト・拡散電流式が導かれることが分かっている。このとき、後方散乱確率は次のようになり、

$$R = \frac{\frac{1}{\lambda} \left[ e^{-\frac{q|E|L}{k_B T}} - 1 \right]}{\frac{1}{\lambda} e^{-\frac{q|E|L}{k_B T}} - \frac{1}{\lambda'}} = \frac{\frac{1}{\lambda} \left[ e^{-\frac{q|E|L}{k_B T}} - 1 \right]}{\frac{1}{\lambda} e^{-\frac{q|E|L}{k_B T}} - \left( \frac{1}{\lambda} + \frac{q|E|}{k_B T} \right)} = \frac{e^{-\frac{q|E|L}{k_B T}} - 1}{e^{-\frac{q|E|L}{k_B T}} - 1 - \lambda \frac{q|E|}{k_B T}} \quad (\text{E.21})$$

さらに、kT レイヤ長を次式で定義すると

$$L_{kT} \equiv \frac{k_B T}{q|E|} = \frac{k_B T}{qV_{DS}/L} = \frac{k_B T}{qV_{DS}} L \quad (\text{E.22})$$

後方散乱確率は次式のように、導体の長さ  $L$ 、kT レイヤ長  $L_{kT}$  および  $\lambda$  を用いて書き表すことができる。

$$R = \frac{e^{-L/L_{kT}} - 1}{e^{-L/L_{kT}} - 1 - \frac{\lambda}{L_{kT}}} = \frac{L_{kT}(e^{-L/L_{kT}} - 1)}{L_{kT}(e^{-L/L_{kT}} - 1) - \lambda} = \frac{L_{kT}(1 - e^{-L/L_{kT}})}{L_{kT}(1 - e^{-L/L_{kT}}) + \lambda} \quad (\text{E.23})$$

さらに、式(E.23)の物理的意味を理解するために、以下で、 $qV_{DS} \ll k_B T$  と  $qV_{DS} \gg k_B T$  の 2 つの極限を考えてみる。

(i)  $qV_{DS} \ll k_B T$  のとき

式(E.22)より  $\frac{qV_{DS}}{k_B T} = \frac{L}{L_{kT}} \ll 1$  を式(E.23)に代入すると

$$R \approx \frac{L_{kT}(1 - 1 + L/L_{kT})}{L_{kT}(1 - 1 + L/L_{kT}) + \lambda} = \frac{L}{L + \lambda} \quad (\text{E.24})$$

となる。これは

$$L \rightarrow 0 \text{ のとき、} R = 0$$

$$L \rightarrow \infty \text{ のとき、} R = 1$$

となることから分かるように、後方散乱確率は導体の長さ  $L$  で決まってくる。したがって、電圧が熱エネルギーよりも十分に小さい場合には、図 E.4 に示すように、後方散乱確率に寄与する散乱の範囲は導体全域に及ぶこと考えることができる。

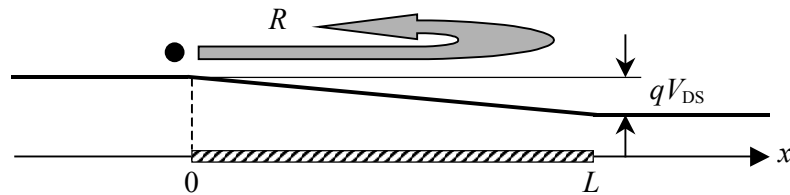


図 E.4 後方散乱確率に寄与する範囲 ( $qV_{DS} \ll k_B T$ ).

(ii)  $qV_{DS} \gg k_B T$  のとき

次に、 $\frac{qV_{DS}}{k_B T} = \frac{L}{L_{kT}} \gg 1$  を式(E.23)に代入すると

$$R \approx \frac{L_{kT}(1 - 0)}{L_{kT}(1 - 0) + \lambda} = \frac{L_{kT}}{L_{kT} + \lambda} \quad (\text{E.25})$$

となる。すなわちこの場合は、後方散乱確率は導体の長さ  $L$  ではなく、kT レイヤ長  $L_{kT}$  で決まってくる。したがって、電圧が熱エネルギーよりも十分に大きい場合には、図 E.5 に示すように、後方散乱確率に寄与する散乱の範囲は、導体全域ではなく kT レイヤに限定されることが分かる。

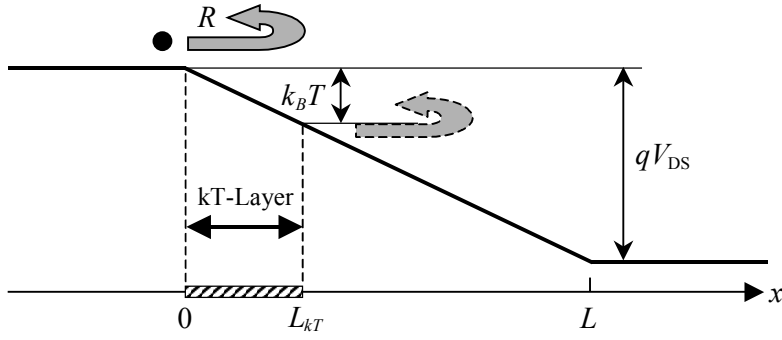


図 E.5 後方散乱確率に寄与する範囲 ( $qV_{DS} \gg k_B T$ ).

[問題 E.1] 式(E.23)を用いて、後方散乱確率の  $qV_{DS} / k_B T$  依存性を計算しグラフに示せ。ただし、 $L / \lambda = 1$  とせよ。

### ドリフト・拡散電流式との関係

以下に示す kT レイヤ理論の 3 つの式から、ドリフト・拡散電流式が導かれることを示す。

○電流密度  $J(x) = -q[a(x) - b(x)]$  (E.26)

○電子密度  $n(x) = \frac{a(x) + b(x)}{v_t}$  (E.27)

$$\because a(x) = n^+ v_t, \quad b(x) = n^- v_t \Rightarrow a(x) + b(x) = (n^+ + n^-) v_t = n v_t$$

○電子密度勾配  $\frac{dn}{dx} = \frac{1}{v_t} \left( \frac{da}{dx} + \frac{db}{dx} \right) = \frac{2}{v_t} \left( -\frac{a}{\lambda} + \frac{b}{\lambda'} \right)$  (E.28)

ここで  $v_t$  は熱速度を表す。式(E.26)の電流密度からドリフト・拡散電流密度が導かれることを示すために、式(E.27)と(E.28)を使ってフラックス  $a$  と  $b$  を電子密度とその勾配で表現する。すなわち、次の 2 つの演算を行う。

$$\begin{array}{l} \frac{a}{\lambda} + \frac{b}{\lambda'} = \frac{n v_t}{\lambda} \\ + \left) -\frac{a}{\lambda} + \frac{b}{\lambda'} = \frac{v_t}{2} \frac{dn}{dx} \right. \\ \hline \left( \frac{1}{\lambda} + \frac{1}{\lambda'} \right) b = \frac{n v_t}{\lambda} + \frac{v_t}{2} \frac{dn}{dx} \end{array} \qquad \begin{array}{l} -\frac{a}{\lambda'} - \frac{b}{\lambda'} = -\frac{n v_t}{\lambda'} \\ + \left) -\frac{a}{\lambda} + \frac{b}{\lambda'} = \frac{v_t}{2} \frac{dn}{dx} \right. \\ \hline -\left( \frac{1}{\lambda} + \frac{1}{\lambda'} \right) a = -\frac{n v_t}{\lambda'} + \frac{v_t}{2} \frac{dn}{dx} \end{array}$$

これらより、フラックス  $a$  と  $b$  を次のように表すことができる。

$$a = \frac{\lambda}{\lambda + \lambda'} n v_t - \frac{\lambda \lambda' v_t}{2(\lambda + \lambda')} \frac{dn}{dx} \quad (E.29)$$

$$b = \frac{\lambda'}{\lambda + \lambda'} n v_t + \frac{\lambda \lambda' v_t}{2(\lambda + \lambda')} \frac{dn}{dx} \quad (E.30)$$

これら 2 式を電流密度の式(E.26)に代入すると

$$J = -q(a - b) = -q \frac{\lambda - \lambda'}{\lambda + \lambda'} n v_t + q \frac{\lambda \lambda' v_t}{\lambda + \lambda'} \frac{dn}{dx} \quad (E.31)$$

となる。これを、次のドリフト・拡散電流密度の式と比較すると

$$J = qn\mu E + qD \frac{dn}{dx} \quad (E.32)$$



拡散係数  $D$  と移動度  $\mu$  は、kT レイヤ理論で用いられるパラメータと次の関係があることが分かる。

$$D = \frac{\lambda \lambda' v_t}{\lambda + \lambda'} \quad (\text{E.33})$$

$$\mu = \frac{\lambda' - \lambda}{\lambda + \lambda'} \frac{v_t}{E} \quad (\text{E.34})$$

これらがアインシュタインの関係

$$\frac{D}{\mu} = \frac{k_B T}{q} \quad (\text{E.35})$$

を満たすためには

$$\frac{D}{\mu} = \frac{\lambda \lambda' E}{\lambda' - \lambda} = \frac{k_B T}{q} \quad \text{よ} \ddot{\text{r}} \quad \frac{q E}{k_B T} = \frac{\lambda' - \lambda}{\lambda \lambda'} = \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \quad (\text{E.36})$$

であれば良い。ここで電界  $E$  は、 $E = -|E|$  ( $< 0$ ) であるので、結局

$$\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} = -\frac{q|E|}{k_B T} \quad (\text{E.37})$$

となり、式 (E.20) の関係が導かれる。さらに式 (E.37) の関係を仮定することによって、移動度と拡散係数は次のように平均自由行程と熱速度で表されることが分かる。

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{\lambda' - \lambda}{\lambda + \lambda'} \cdot \frac{v_t}{-|E|} = \frac{\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}}{\frac{1}{\lambda} + \frac{1}{\lambda'}} \cdot \frac{v_t}{-|E|} = \frac{-\frac{q|E|}{k_B T}}{\frac{1}{\lambda} + \frac{1}{\lambda} + \frac{q|E|}{k_B T}} \cdot \frac{v_t}{-|E|} = \frac{\frac{q}{k_B T} v_t}{\frac{2}{\lambda} + \frac{q|E|}{k_B T}} = \frac{\lambda v_t}{2} \frac{q}{k_B T} \frac{1}{1 + \frac{\lambda q|E|}{2 k_B T}} \\ &\approx \frac{\lambda v_t}{2} \frac{q}{k_B T} \quad \left( \frac{\lambda q|E|}{2 k_B T} \ll 1 \right) \end{aligned} \quad (\text{E.38})$$

$$\begin{aligned} D &= \frac{\lambda \lambda' v_t}{\lambda + \lambda'} = \frac{v_t}{\frac{1}{\lambda} + \frac{1}{\lambda'}} = \frac{v_t}{\frac{1}{\lambda} + \frac{1}{\lambda} + \frac{q|E|}{k_B T}} = \frac{v_t}{\frac{2}{\lambda} + \frac{q|E|}{k_B T}} = \frac{\lambda v_t}{2} \frac{1}{1 + \frac{\lambda q|E|}{2 k_B T}} \\ &\approx \frac{\lambda v_t}{2} \quad \left( \frac{\lambda q|E|}{2 k_B T} \ll 1 \right) \end{aligned} \quad (\text{E.39})$$

以上のように kT レイヤ理論は、式 (E.37) の関係を仮定すると、古典的なドリフト・拡散モデルと等価な理論であると言える。

## 参考文献

- [1] 渡辺久恒、“半導体産業の進化”、応用物理学会誌、2008年8月号.
- [2] 谷口研二、宇野重康、“絵から学ぶ半導体デバイス工学”、昭晃堂.
- [3] 高木信一、“ポストスケーリング時代のCMOSデバイス技術”、電子情報通信学会誌、2009年1月号.
- [4] 平本俊郎 [編著]、内田 建、杉井 信之、竹内 潔 [著]、“集積ナノデバイス”、丸善 (2009).
- [5] 平本俊郎、“基礎講座 微細MOSトランジスタの動作原理”、応用物理学会誌、1998年5月号.
- [6] 名取研二、“バルスティックMOSから準バルスティックMOSへ”、ゲートスタック研究会－材料・プロセス・評価の物理－第14回研究会ショートコース、2009年.
- [7] 鈴木龍太、更屋拓哉、平本俊郎、“ $\alpha$ 乗則に基づく65nm世代MOSFETの輸送特性解析”、第69回応用物理学会学術講演会、4p-E-11、2008年.
- [8] 平本俊郎、竹内潔、西田彰男、“MOSトランジスタのスケーリングに伴う特性ばらつき”、電子情報通信学会誌、2009年6月号.
- [9] 高木信一、“Si MOSFETの微細化限界”、電子情報通信学会誌、2002年11月号.
- [10] K. Natori, “Ballistic Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor,” *J. Appl. Phys.*, vol. 76, no. 8, pp. 4879-4890, 1994.
- [11] K. Natori, “Scaling Limit of the MOS transistor –A Ballistic MOSFET–,” *IEICE Trans. Electron.*, vol. E84-C, no. 8, pp. 1029-1036, 2001.
- [12] K. Natori, T. Shimizu, and T. Ikenobe, “Multi-subband effects on performance limit of nanoscale MOSFETs,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 42, no. 4B, pp. 2063-2066, 2003.
- [13] H. Tsuchiya, K. Fujii, T. Mori, and T. Miyoshi, “A quantum-corrected Monte Carlo study on quasi-ballistic transport in nanoscale MOSFETs,” *IEEE Trans. on Electron Devices*, vol. 53, no. 12, pp. 2965-2971, 2006.
- [14] M. Lundstrom, “Elementary scattering theory of the Si MOSFET,” *IEEE Electron Device Letters*, vol. 18, no. 7, pp. 361-363, 1997.
- [15] H. Tsuchiya and S. Takagi, “Influence of elastic and inelastic phonon scattering on the drive current of quasi-ballistic MOSFETs,” *IEEE Trans. on Electron Devices*, vol. 55, no. 9, pp. 2397-2402, 2008.
- [16] 高木信一、“Si系高移動度MOSトランジスタ技術”、応用物理学会誌、2005年9月号.
- [17] K. Uchida, T. Krishnamohan, K. C. Saraswat, and Y. Nishi, “Physical mechanisms of electron mobility enhancement in uniaxial stressed MOSFETs and impact of uniaxial stress engineering in ballistic regime,” in *IEDM Tech. Dig.*, 2005, pp. 135-138.
- [18] T. Maegawa, T. Yamauchi, T. Hara, H. Tsuchiya, and M. Ogawa, “Strain effects on electronic bandstructures in nanoscaled silicon: From bulk to nanowire,” *IEEE Trans. on Electron Devices*, vol. 56, no. 4, pp. 553-559, 2009.
- [19] S. Takagi, J. Koga, and A. Toriumi, “Mobility Enhancement of SOI MOSFETs due to Subband Modulation in Ultrathin SOI Films,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 37, no. 3B, pp. 1289-1294, 1998.
- [20] K. Uchida, H. Watanabe, A. Kinoshita, J. Koga, T. Numata, and S. Takagi, “Experimental Study on Carrier Transport Mechanism in Ultrathin-body SOI n- and p-MOSFETs with SOI Thickness less than 5nm,” in *IEDM Tech. Dig.*, 2002, pp. 47-50.
- [21] M. V. Fischetti, L. Wang, B. Yu, C. Sachs, P. M. Asbeck, Y. Taur, and M. Rodwell, “Simulation of electron transport in high-mobility MOSFETs: Density of states bottleneck and source starvation,” in *IEDM Tech. Dig.*, 2007, pp. 109-112.
- [22] M. V. Fischetti, S. Jin, T.-W. Tang, P. Asbeck, Y. Taur, S. E. Laux, M. Rodwell, and N. Sano, “Scaling MOSFETs to 10nm: Coulomb effects, source starvation, and virtual source model,” *J. Comp. Electron.*, vol. 8, no. 2, pp. 60-77, Jun. 2009.

- [23] T. Mori, Y. Azuma, H. Tsuchiya, and T. Miyoshi, "Comparative study on drive current of III-V semiconductor, Ge and Si channel n-MOSFETs based on quantum-corrected Monte Carlo simulation", *IEEE Trans. on Nanotechnology*, vol. 7, no. 2, pp 237-241, 2008.
- [24] Hideaki Tsuchiya, Akihiro Maenaka, Takashi Mori, and Yūsuke Azuma, "Role of Carrier Transport in Source and Drain Electrodes of High-Mobility MOSFETs," *IEEE Electron Device Letters*, Vol. 31, No. 4, pp. 365-367, Apr. 2010.
- [25] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, and A.A. Firsov, "Electric field effect in atomically thin carbon films," *Science*, vol. 306, pp. 666-669, Oct. 2004.
- [26] K.I. Bolotin, K.J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, P. Kim, and H.L. Stormer, "Ultrahigh electron mobility in suspended graphene," *Solid State Comm.*, vol. 146, pp. 351-355, 2008.
- [27] M. Han, B. Özyilmaz, Y. Zhang, and P. Kim, "Energy band-gap engineering of graphene nanoribbons," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, no. 20, 206805, 2007.
- [28] X. Li, X. Wang, L. Zhang, S. Lee, and H. Dai, "Chemically derived, ultrasmooth graphene nanoribbon semiconductors," *Science*, vol. 319, pp. 1229-1232, 2008.
- [29] T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn, and E. Rotenberg, "Controlling the electronic structure of bilayer graphene," *Science*, vol. 313, pp. 951-954, 2006.
- [30] S. Zhou, G.-H. Gweon, A. Fedorov, P. First, W. de Heer, D.-H. Lee, F. Guinea, A. Castro Neto, and A. Lanzara, "Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene," *Nat. Mater.*, vol. 6 pp. 770-775, 2007.
- [31] G. Giovannetti, P. Khomyakov, G. Brockes, P. Kelly, and J. van den Brink, "Substrate-induced band gap in graphene on hexagonal boron nitride: *Ab initio* density functional calculations," *Phys. Rev. B*, vol. 76, no. 7, 073103, 2007.
- [32] Y.W. Son, M.L. Cohen, and S.G. Louie, "Energy gaps in graphene nanoribbons," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 97, no. 21, p. 216803, Nov. 2006.
- [33] H. Hosokawa, R. Sako, H. Ando, and H. Tsuchiya, "Performance comparisons of bilayer graphene and graphene nanoribbon field-effect transistors under ballistic transport," *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 49, 110207, 2010.
- [34] H. Min, B. Sahu, S.K. Banerjee, and A.H. MacDonald, "*Ab initio* theory of gate induced gaps in graphene bilayers," *Phys. Rev. B*, vol. 75, no. 15, p. 155115, Apr. 2007.
- [35] N. Harada, M. Ohfuti, and Y. Awano, "Performance estimation of graphene field-effect transistors using semiclassical Monte Carlo simulation," *Appl. Phys. Express*, vol. 1, 024002, 2008.
- [36] R. Sako, H. Tsuchiya, and M. Ogawa, "Influence of band-gap opening on ballistic electron transport in bilayer graphene and graphene nanoribbon FETs," *IEEE Trans. on Electron Devices*, Vol. 58, No. 10, pp. 3300-3306, Oct. 2011.
- [37] 平本俊郎、"新構造 MOS トランジスタ技術"、電子情報通信学会誌、2006 年 2 月号。
- [38] Y. Yamada, H. Tsuchiya, and M. Ogawa, "Quantum transport simulation of silicon-nanowire transistors based on direct solution approach of the Wigner transport equation", *IEEE Trans. on Electron Devices*, vol. 56, no. 7, pp. 1396-1401, 2009.
- [39] Hideaki Tsuchiya, Haruki Ando, Shun Sawamoto, Tadashi Maegawa, Takeshi Hara, Hironobu Yao, and Matsuto Ogawa, "Comparisons of Performance Potentials of Silicon Nanowire and Graphene Nanoribbon MOSFETs Considering First-Principles Bandstructure Effects," *IEEE Trans. on Electron Devices*, Vol. 57, No. 2, pp. 406-414, Feb. 2010.
- [40] 木下敦寛、内田建、古賀淳二、"不純物偏析ショットキー接合を用いた高駆動電流トランジスタの開発"、東芝レビュー、vol. 61, no. 5, pp. 33-36, 2006 .

- [41] W. Wang, H. Tsuchiya, and M. Ogawa, "Enhancement of ballistic efficiency due to source to channel heterojunction barrier in Si metal oxide semiconductor field effect transistors," *J. Appl. Phys.*, vol. 106, 024515 (2009).
- [42] 半導体 MIRAI プロジェクト ([http://www.miraijp.jp/mirai\\_j/](http://www.miraijp.jp/mirai_j/)).
- [43] J. Appenzeller, Y.-M. Lin, J. Knoch, and Ph. Avouris, "Band-to-band tunneling in carbon nanotube field-effect transistors," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 93, no. 19, 196805, Nov. 2004.
- [44] W. Y. Choi, B.-G. Park, J. D. Lee, and T.-J. K. Liu, "Tunneling field-effect transistors (TFETs) with subthreshold swing (SS) less than 60 mV/dec," *IEEE Electron Device Letters*, Vol. 28, No. 8, pp. 743-745, Aug. 2007.
- [45] K. Gopalakrishnan, P. B. Griffin, and J. D. Plummer, "Impact ionization MOS (I-MOS)-Part I: Device and circuit simulations," *IEEE Trans. on Electron Devices*, Vol. 52, No. 1, pp. 69-76, Jan. 2005.
- [46] K. Gopalakrishnan, R. Woo, C. Jungemann, P. B. Griffin, and J. D. Plummer, "Impact ionization MOS (I-MOS)-Part II: Experimental results," *IEEE Trans. on Electron Devices*, Vol. 52, No. 1, pp. 77-84, Jan. 2005.
- [47] K. Gopalakrishnan, P. B. Griffin, and J. D. Plummer, "I-MOS: A novel semiconductor device with a subthreshold slope lower than  $kT/q$ ," in *IEDM Tech. Dig.*, 2002, pp. 289-292.
- [48] C.-W. Lee, A. Afzalian, N. D. Akhavan, R. Yan, I. Ferain, and J.-P. Colinger, "Junctionless multigate field-effect transistor," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 94, 053511, Feb. 2009.
- [49] J.-P. Colinger, C.-W. Lee, A. Afzalian, N. D. Akhavan, R. Yan, I. Ferain, P. Razavi, B. O'Neill, A. Blake, M. White, A.-M. Kelleher, B. McCarthy, and R. Murphy, "Nanowire transistors without junctions," *Nature Nanotech.*, vol. 5, pp. 225-229, Mar. 2010.
- [50] P. Razavi, N. D.-Akhavan, R. Yu, G. Fagas, I. Ferain, J.-P. Colinge, "Investigation of short-channel effects in junctionless nanowire transistors," Extended Abstracts of Int'l Conf. on Solid State Devices and Materials (SSDM11), Nagoya, pp. 106-107, 28-30 Sep., 2011.
- [51] 高木信一, "MOS デバイスの量子効果", 文部科学省第二回ナノテクノロジーサマースクール「量子効果素子の物理」, 2006 年.
- [52] S. Takagi, A. Toriumi, M. Iwase, and H. Tango, "On the universality of inversion layer mobility in Si MOSFET's: Part I-Effects of substrate impurity concentration," *IEEE Trans. on Electron Devices*, vol. 41, no. 12, pp. 2357-2362, 1994.
- [53] S. Takagi, A. Toriumi, M. Iwase, and H. Tango, "On the universality of inversion layer mobility in Si MOSFET's: Part II-Effects of surface orientation," *IEEE Trans. on Electron Devices*, vol. 41, no. 12, pp. 2363-2368, 1994.
- [54] 三好旦六, 小川真人, 土屋英昭, "ナノエレクトロニクスの基礎", 培風館 (2007).
- [55] 富澤一隆, "半導体デバイスシミュレーション" コロナ社 (1996).
- [56] S. Takagi and A. Toriumi, "Quantitative understanding of inversion-layer capacitance in Si MOSFET's," *IEEE Trans. on Electron Devices*, vol. 42, no. 12, pp. 2125-2130, 1995.
- [57] S. Luryi, "Quantum capacitance devices," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 52, no. 6, pp. 501-503, 1988.
- [58] M. Lundstrom and Z. Ren, "Essential physics of carrier transport in nanoscale MOSFETs," *IEEE Trans. on Electron Devices*, vol. 49, no. 1, pp. 133-141, 2002.
- [59] J. P. McKelvey, "Alternative Approach to the Solution of Added Carrier Transport Problems in Semiconductors," *Phys. Rev.*, vol. 123, no. 1, pp. 51-57, 1961.
- [60] M. Lundstrom, "Fundamentals of Carrier Transport," 2<sup>nd</sup> edition, *Cambridge University Press*, 2000.
- [61] 鎌倉良成, "微細 MOSFET におけるバリスティック伝導", SSDM ショートコース, 2006.