



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	シリコンの複素屈折率について : サブミリ波より赤外線領域
Author(s)	小川, 吉彦; Ogawa, Yoshihiko
Citation	北海道大學工學部研究報告, 82, 47-57
Issue Date	1976-12-07
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/41394
Type	departmental bulletin paper
File Information	82_47-58.pdf



シリコンの複素屈折率について

— サブミリ波より赤外線領域 —

小川 吉彦*

(昭和 51 年 6 月 24 日受理)

On the Complex Refractive Index of Silicon

— Wavelength from an Millimeter to a Few Micrometers —

Yoshihiko OGAWA

(Received June 24, 1976)

Abstract

Complex refractive indices of silicons are calculated by using the Lorentz classical theory in a wavelength range of 1 millimeter to five micrometers. Reflectivities normal to a silicon surface are also calculated. The main conclusions from the results of calculations are as follows: (a) For any wavelength (λ), there exists the carrier density (n_{\min}) to which the reflectivity becomes minimum, and the relation of λ and n_{\min} are $\lambda \propto n_{\min}^{-2}$ ($b=0.48\sim 0.49$), (b) In a temperature range of $200\sim 400^\circ\text{K}$, complex refractive indices of *P*-type silicon are almost independent of the temperature, while those of *N*-type are slightly dependent and those of the case of high injection are dependent to some extent (especially in a range of long wavelengths).

1. ま え が き

I 形シリコンは吸収端波長よりも長波長の電磁波に対し共鳴スペクトル吸収のような現象を除けば屈折率がほとんど一定であることは良く知られている。しかし不純物半導体ではキャリアと電磁波との相互作用を無視できなく、屈折率に複雑な分散特性を生じることになる。赤外線よりサブミリ波にかけての一般のシリコン材料の複素屈折率の考察が従来なされていないようであるので、本論文でこのことの解析を行った。

解析に際しては、厳密には量子論的取り扱いをすべきであるが、広範な波長範囲にわたってこれを行うのは容易でないし、また特にサブミリ波側に対しこのような取り扱いをする必要はほとんどないので、本論文ではローレンツの古典理論を使って解析した。数値解析の結果は全て波長と温度をパラメータにし、キャリア濃度に対する複素誘電率、複素屈折率、垂直入射時反射率の関係を求める形にしてある。

2. 解 析

室温程度でのシリコンのような等極性半導体の赤外線からサブミリ波にかけての電磁波の複素屈折率を考える場合に最も重要なのは電磁波と格子振動および自由キャリアとの相互作用である。本章においてもこのことだけを考慮の対象にする。この他にも対象とすべき種々の原因がも

ちろん存在する。例えば等極性半導体では化合物半導体のように異種の原子間結合による電気双極子群の振動のための吸収過程は本来無いはずであるが、実際にシリコンで例えば $61, 89.6 \text{ mm}^{-1}$ なる波数のところにこの吸収スペクトルが観測されている。これは光によって双極子が形成され、これと光がさらに強く結合してホノンを作り出すと言った2次の過程で生じていると考えられている。しかし、このような線スペクトルの効果はここで考慮しないことにする。またホットエレクトロンによる吸収、不純物や格子欠陥による吸収など種々の吸収過程があるが全て考えないことにする。

シリコン中の自由キャリアの散乱効果による光吸収過程は、エネルギーと運動量の保存を同時に満足しなければならぬため3粒子(光子、キャリア、音響ホノンまたは光子、キャリア、イオン化不純物粒子)の相互作用過程となり量子論的には2次の摂動となる。この他に自由正孔の価電子帯内サブバンド間遷移も考慮する必要がある。これらのことを波長 $10.6 \mu\text{m}$ で量子論的に考察した結果は文献1)に示してある。こう言った取り扱いを広範な波長範囲で行うことは著るしく困難であり、また長波長領域に対してはあまり意味がなくなるので、ここではローレンツの古典理論を使って複素屈折率の解析をする。

初めに使う記号を列記しておく。

E : 印加電界	E_L : ローレンツ電界
P : 巨視的(平均的)誘電分極	ω : 電磁波角振動数
ω_0 : 価電子固有振動数	m_0 : 電子質量
m_n : 自由電子導電有効質量	m_p : 自由正孔導電有効質量
$m_n \cdot g_n$: 自由電子抵抗力定数	$m_p \cdot g_p$: 自由正孔抵抗力定数
q : 電子電荷	σ : 導電率
ϵ_0 : 真空誘電率	ϵ_s : 比誘電率
$\tilde{\alpha}$: 複素分極率	$\hat{\epsilon}$: 複素比誘電率
\tilde{n} : 複素屈折率	\bar{n} : 屈折率
$\bar{\kappa}$: 減衰係数	x_l : 価電子の平衡点よりの変位
x_n : 自由電子の平衡点よりの変位	x_p : 自由正孔の平衡点よりの変位
n : 自由電子濃度	p : 自由正孔濃度
N : 価電子濃度	R : 垂直入射時反射率

電界の向きが x 方向である平面電磁波を考えることにし、次の仮定をする

- 格子振動と自由キャリア振動間には相互作用はない。
- 格子振動は音響モードで振動し、抵抗力は無視する。
- 自由キャリア振動に対しては回復力とローレンツ場の影響は無視する。
- 電磁波によるキャリア励起は無視する。

シリコンに対しては上述の仮定はいずれも妥当である。これより次の三つの運動方程式が得られる。

$$\left. \begin{aligned} m_0 \dot{x}_l + m_0 \omega_0^2 x_l &= -q(E + E_L) \\ m_n \dot{x}_n + m_n g_n \dot{x}_n &= -qE \\ m_p \dot{x}_p + m_p g_p \dot{x}_p &= -qE \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

ローレンツ電界 E_L と分極 P および印加電界 E の間には次の関係がある。

$$E_L = P/(3\epsilon_0), \quad P = \hat{\alpha}E \quad (2)$$

P は荷電粒子の変位に比例するから

$$P = -qNx_l - qnx_n + qp_x p_p \quad (3)$$

である。いま $E = E_0 \exp(-j\omega t)$ とすると、(1)~(3) より

$$\tilde{\alpha} = \frac{q^2 N}{m_0} \cdot \frac{1}{\omega_0^2 - \omega_L^2 - \omega^2} \cdot \left\{ 1 - \frac{m_0 n}{m_n N} \cdot \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{\omega(\omega + jg_n)} - \frac{m_0 p}{m_p N} \cdot \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{\omega(\omega + jg_p)} \right\} \quad (4)$$

$$\omega_L^2 = q^2 N / (3\varepsilon_0 m_0)$$

$\tilde{\alpha}$ と $\tilde{\varepsilon}$ の間には

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\alpha} &= \varepsilon_0 (\tilde{\varepsilon} - 1) \\ \tilde{\varepsilon} &= \varepsilon_s + j\sigma / (\omega\varepsilon_0) \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

の関係があり、 \tilde{n} と $\tilde{\varepsilon}$ とには

$$\tilde{n} = \tilde{n} + j\tilde{k} = \sqrt{\tilde{\varepsilon}} \quad (6)$$

の関係があるので、(5), (6) より

$$\left. \begin{aligned} \tilde{n}^2 - \tilde{k}^2 &= \varepsilon_s \\ 2\tilde{n} \cdot \tilde{k} &= \frac{\sigma}{\omega\varepsilon_0} \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

あるいは

$$\left. \begin{aligned} \tilde{n}^2 &= \frac{1}{2} \left\{ \sqrt{\varepsilon_s^2 + \left(\frac{\sigma}{\omega\varepsilon_0} \right)^2} + \varepsilon_s \right\} \\ \tilde{k}^2 &= \frac{1}{2} \left\{ \sqrt{\varepsilon_s^2 + \left(\frac{\sigma}{\omega\varepsilon_0} \right)^2} - \varepsilon_s \right\} \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

となる。また電磁波の垂直入射に対する反射率 R は

$$R = \left| \frac{\tilde{n} - 1}{\tilde{n} + 1} \right|^2 = \frac{(\tilde{n} - 1)^2 + \tilde{k}^2}{(\tilde{n} + 1)^2 + \tilde{k}^2} \quad (9)$$

である。

3. ω_0 , g_n , g_p , m_n , m_p の決定

熱平衡状態の I 形シリコンでは、 n , p が無視できて (4) 式は

$$\tilde{\alpha} = \frac{q^2 N}{m_0} \cdot \frac{1}{\omega_0^2 - \omega_L^2 - \omega^2} \quad (10)$$

となり $\tilde{\alpha}$ は実数である。これより屈折率 \tilde{n} は

$$\tilde{n}^2 = \varepsilon_s = 1 + \frac{q^2 N}{m_0 \varepsilon_0} \cdot \frac{1}{\omega_0^2 - \omega_L^2 - \omega^2} \quad (11)$$

I 形シリコンは吸収端波長近くまで屈折率はほぼ一定なことが判っているので、(11) 式中の ω を省略し ε_s として直流時の値 11.7 を使うことにする。またシリコンの格子点濃度は $5 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ なので、 N をこの 4 倍に取って ω_0 が次のように求まる。

$$\omega_0 = \sqrt{\{1/3 + 1/(\varepsilon_s - 1)\} \cdot (q^2 N) / (m_0 \varepsilon_0)} = 1.65 \times 10^{16} (\text{s}^{-1}) \quad (12)$$

この波長換算値は $0.1 \mu\text{m}$ 程度であるから、赤外線以上の長波長に対しては (10) 式の ω を無視してよい。(12) 式の ω_0 は Salzberg 等²⁾ の実測より求めた値とほぼ一致する。

次に g_n を求める。(1) 式より

$$m_n \ddot{x}_n + m_n g_n \dot{x}_n = -qE$$

これを多数の衝突回数を含む時間 T_c で積分すると

$$[m_n \dot{x}_n]_0^{T_c} + [m_n g_n x_n]_0^{T_c} = -qET_c$$

上式左辺第一項は弾性衝突ごとに0になるので結局0である。左辺第二項の $[x_n]_0^{T_c}$ は T_c 時間のキャリアの走行距離であるから、自由電子のドリフト移動度を μ_n とすると $\mu_n ET_c$ に等しい。したがって

$$g_n = q/(\mu_n m_n) \quad (13)$$

となる。 g_p についても同様にして

$$g_p = q/(\mu_p m_p) \quad (14)$$

最後に導電率有効質量を調べる。自由電子の導電率 σ は

$$\sigma = q^2 n \langle \tau_m \rangle / m_n \quad (15)$$

で与えられる。ここに $\langle \tau_m \rangle$ は運動量緩和時間であり、 m_n は

$$3/m_n = 2/m_{nt} + 1/m_{nl} \quad (16)$$

で与えられる。ここに m_{nt} , m_{nl} は各々伝導体定エネルギー回転楕円体面の軸方向有効質量および垂直方向有効質量であり、 $m_{nt} = 0.97 m_0$, $m_{nl} = 0.19 m_0$ である。これより $m_n = 0.26 m_0$ となる。

価電子帯の定エネルギー面は断面が歪円 (warped circle) になっているが等方性である。しかしサブバンドに分裂しており、軽い正孔と重い正孔が存在する。両者の運動量緩和時間が等しいと近似すると

$$\sigma = \left\{ (p_h/m_{ph}) + (p_l/m_{pl}) \right\} \cdot q^2 \langle \tau_m \rangle \quad (17)$$

となる。ここに m_{ph} , m_{pl} は各々重い正孔、軽い正孔の有効質量であり、 p_h , p_l はそれぞれの正孔の濃度である³⁾。シリコンでは $m_{ph} = 0.49 m_0$, $m_{pl} = 0.16 m_0$ であり、また $p_l/p_h = 0.16$ である。いま m_p として

$$\sigma = (p/m_p) \cdot q^2 \langle \tau_m \rangle, \quad p = p_h + p_l \quad (18)$$

なる値を採用することになると、 $m_p = 0.38 m_0$ となる。

阿部等⁴⁾によると、 m_n , m_p は不純物濃度にも影響され未知の量であり、反射率と計算値が一致するように実験的に求めるべきであると主張しているが、広範な波長範囲にわたってこのことを逐一実行することもできないので上述の結果を使うことにする。

4. 移動度

ここで考察している温度範囲や不純物濃度範囲で問題とすべき移動度は格子散乱移動度 μ_L 、不純物散乱移動度 μ_I および電荷-電荷散乱移動度 μ_C の3種類である。

μ_L については自由電子、正孔のそれらを μ_{Ln} , μ_{Lp} とすると

$$\left. \begin{aligned} \mu_{Ln} &= 2.1 \times 10^9 \cdot T^{-2.5} & (\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}) \\ \mu_{Lp} &= 2.3 \times 10^9 \cdot T^{-2.7} & (\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}) \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

で表わされる。ここに T は絶対温度である。

μ_I については自由電子、正孔のそれらを μ_{In} , μ_{Ip} とすると

$$\mu_{In} = 4.7 \times 10^{17} \cdot \left(\frac{m_0}{m_n} \right)^{1/2} \cdot \frac{T^{3/2}}{N_I \ln(1 + 4.5 \times 10^8 \cdot T^2/N_I^{2/3})} \quad (\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}) \quad (20)$$

である。ここに N_I はイオン化不純物濃度 (cm^{-3}) である。なお μ_{I_p} は上式の m_n を m_p に代えればよい。

μ_C は高注入状態 ($n=p$) で問題となり、両キャリアについて同じ値を取り

$$\mu_C = 1.38 \times 10^{17} \cdot \left(\frac{m_0}{m_n} + \frac{m_0}{m_p} \right)^{1/2} \cdot \frac{T^{3/2}}{n \ln(1 + 8 \times 10^8 \cdot T^2/n^{2/3})} \quad (21)$$

である。(19)~(21) 式より、 μ_n , μ_p は

$$\left. \begin{aligned} 1/\mu_n &= 1/\mu_{Ln} + 1/\mu_{In} + 1/\mu_C \\ 1/\mu_p &= 1/\mu_{Lp} + 1/\mu_{Ip} + 1/\mu_C \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

と求まる。

以上の結果をまとめると、(4) 式は

$$\left. \begin{aligned} \frac{\tilde{\alpha}}{\epsilon_0} = \epsilon - 1 &= 10.7 \times \left\{ 1 - \frac{3.85 n}{N} \cdot \frac{\omega_0^2}{\omega(\omega + jg_n)} - \frac{2.63 p}{N} \cdot \frac{\omega_0^2}{\omega(\omega + jg_p)} \right\} \\ \omega_0^2 &= 2.72 \times 10^{32} \quad (\text{s}^{-2}) \\ g_n &= 6.76 \times 10^{15}/\mu_n \quad (\text{s}^{-1}) \\ g_p &= 4.63 \times 10^{15}/\mu_p \quad (\text{s}^{-1}) \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

となる。

5. 計算結果

図1に波長 λ をパラメータにし、300°KにおけるP形シリコンの比誘電率 ϵ_s および導電率 σ

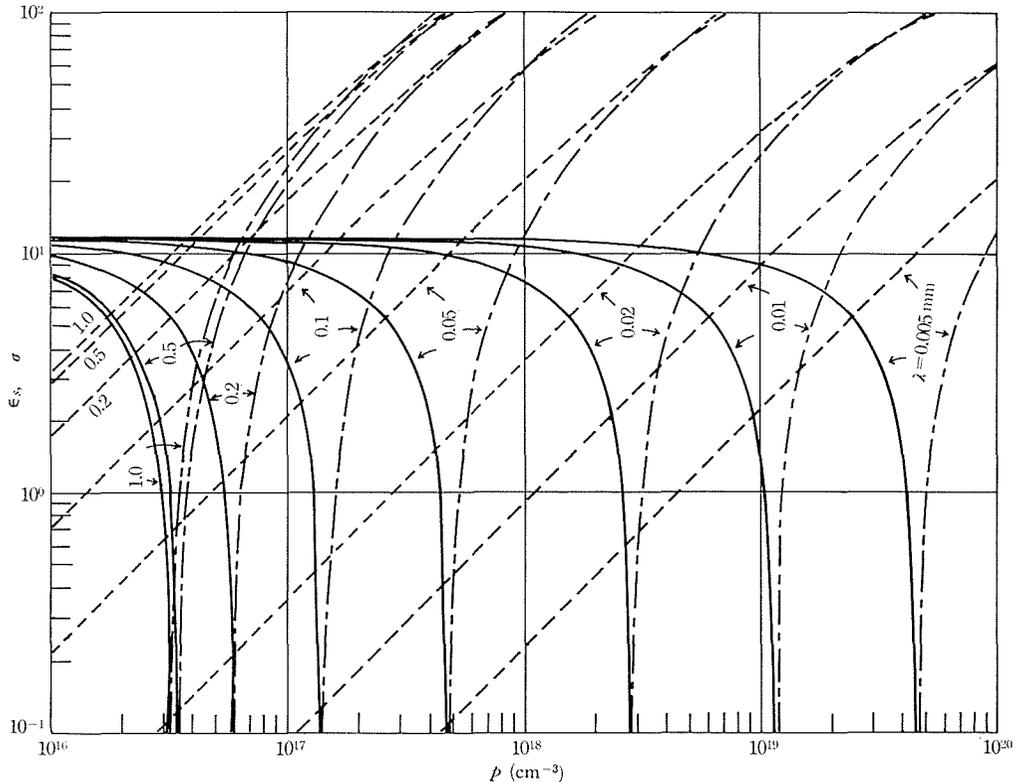


図1 P形シリコンの ϵ_s , σ 対 p 特性

(波長 λ : パラメータ, $T=300^\circ\text{K}$, ϵ_s : 実線(正)および鎖線(負), σ : 破線)

と正孔濃度 p の関係を示す。 p の充分低いところでは $\epsilon_s=11.7$, $\sigma \approx 0$ である。これは (23) 式の右辺第一項、すなわち格子振動により定まる特性である。各曲線とも、ある正孔濃度値を境にして ϵ_s の符号が反転している。この $\epsilon_s=0$ の点は、いわゆるプラズマ端反射点である。また σ 曲線の直線部分は傾斜が 1 で、 $\sigma \propto p$ を意味する。同一の p に対しては波長が短くなるほど σ は小さくなる。しかし波長が 1 mm 以上程度になると波長特性がほぼなくなり、直流時の値に漸近する。

複素屈折率 $\bar{n} = \bar{n} + j\bar{\kappa}$ とキャリア濃度との関係を図 2 に示す。(a) は P 形シリコン、(b) は N 形シリコン、(c) は I 形シリコンにキャリアを高注入した場合である。屈折率 \bar{n} に極小点が存在するのはプラズマ端反射のためである。減衰係数 $\bar{\kappa}$ のキャリア濃度依存性は単純でないが次のような傾向がある。P 形と N 形を比較すると、低キャリア濃度側で P 形の方が $\bar{\kappa}$ が大きく、高濃度側で N 形の方が $\bar{\kappa}$ が大きい。また I 形高注入は P 形、N 形に比べて $\bar{\kappa}$ が小さい。

垂直入射時反射率 R は図 3 のようになる。 R を最小 (R_{\min}) にするキャリア濃度 (n_{\min} または p_{\min}) が存在し、この点はプラズマ端反射点に近いところにある。短波長側ではプラズマ端反射点における $\bar{\kappa}$ が小さいので両者はほぼ一致するが、長波長側では少しずれる。 $R=R_{\min}$, $n=n_{\min}$ (または $p=p_{\min}$) に対応する λ を λ_{\min} とし、 R_{\min} , λ_{\min} の値を示したのが図 4 である。実線が λ_{\min} である。 n_{\min} または p_{\min} のどちらかであることを c_{\min} と表わすことにすると $\lambda_{\min} \propto c_{\min}^b$ ($b=0.48 \sim 0.49$) となる。同一の λ_{\min} に対しては P 形、N 形、I 形高注入の順で c_{\min} が小さくなる。破線は R_{\min} であり、同一の c_{\min} に対しては N 形、I 形高注入、P 形の順で R_{\min} が大きくなっている。 c_{\min} は電磁波的に半導体の性質を区別する境界と考えることができる。所定の

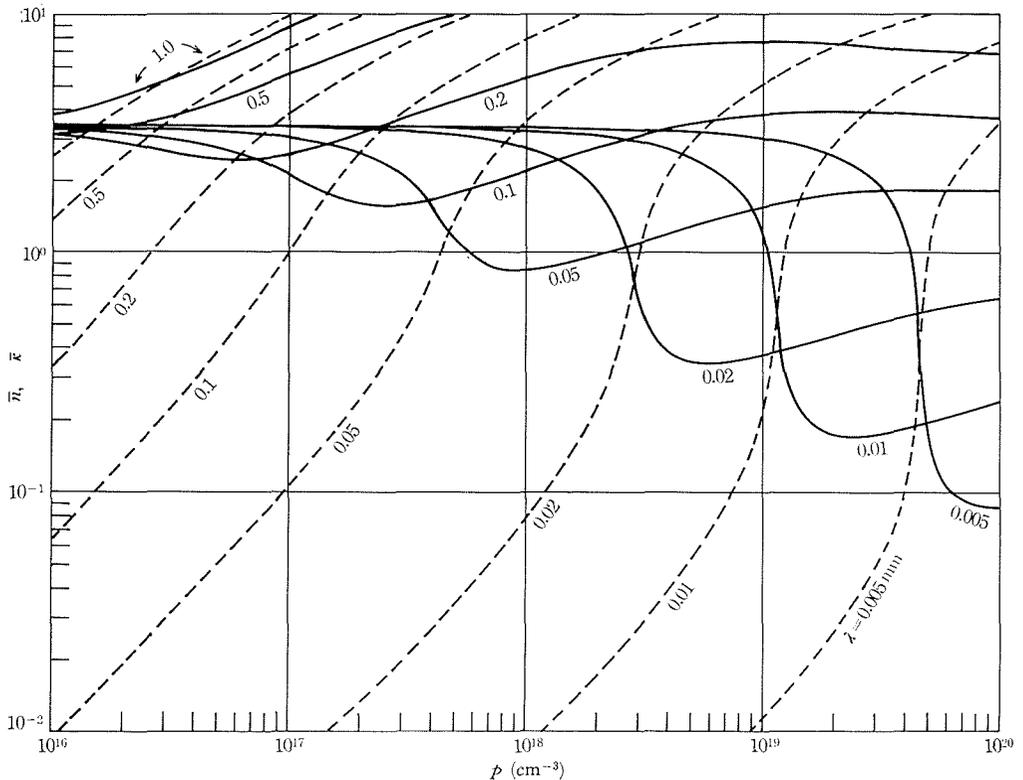


図 2 (a) P 形シリコンの \bar{n} , $\bar{\kappa}$ 対 p 特性

(λ : パラメータ, $T=300^\circ\text{K}$, \bar{n} : 実線, $\bar{\kappa}$: 破線)

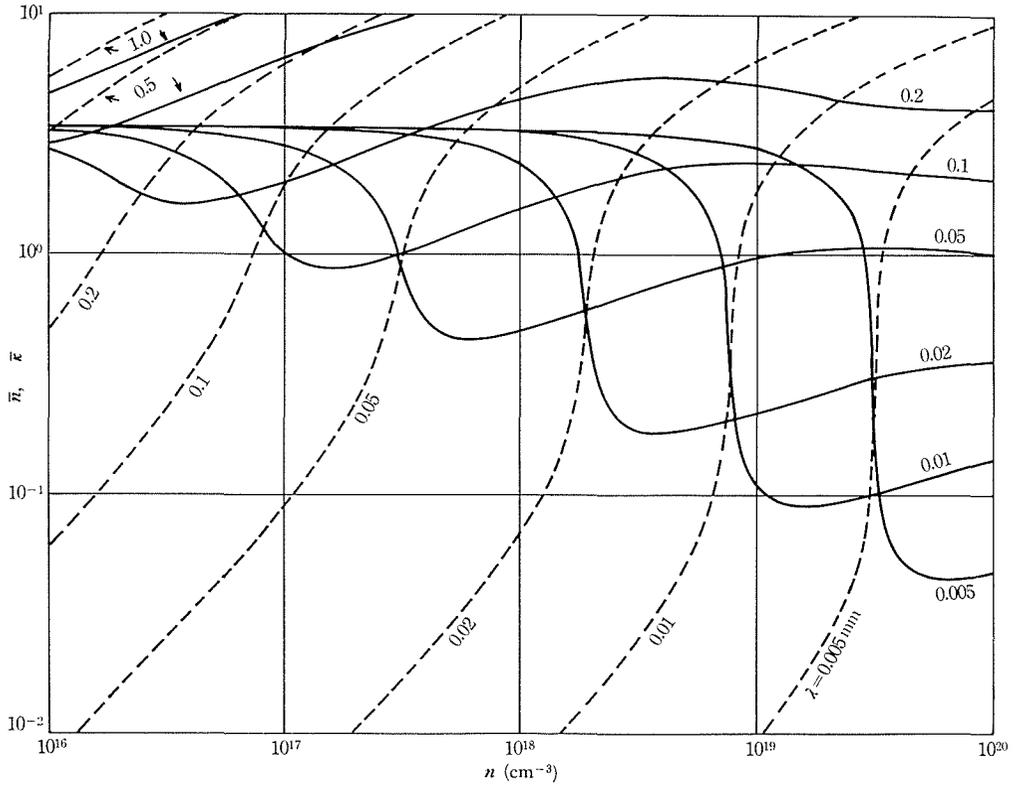


図2 (b) N形シリコンの \bar{n} , \bar{k} 対 n (λ : パラメータ, $T=300^\circ\text{K}$, \bar{n} : 実線, \bar{k} : 破線)

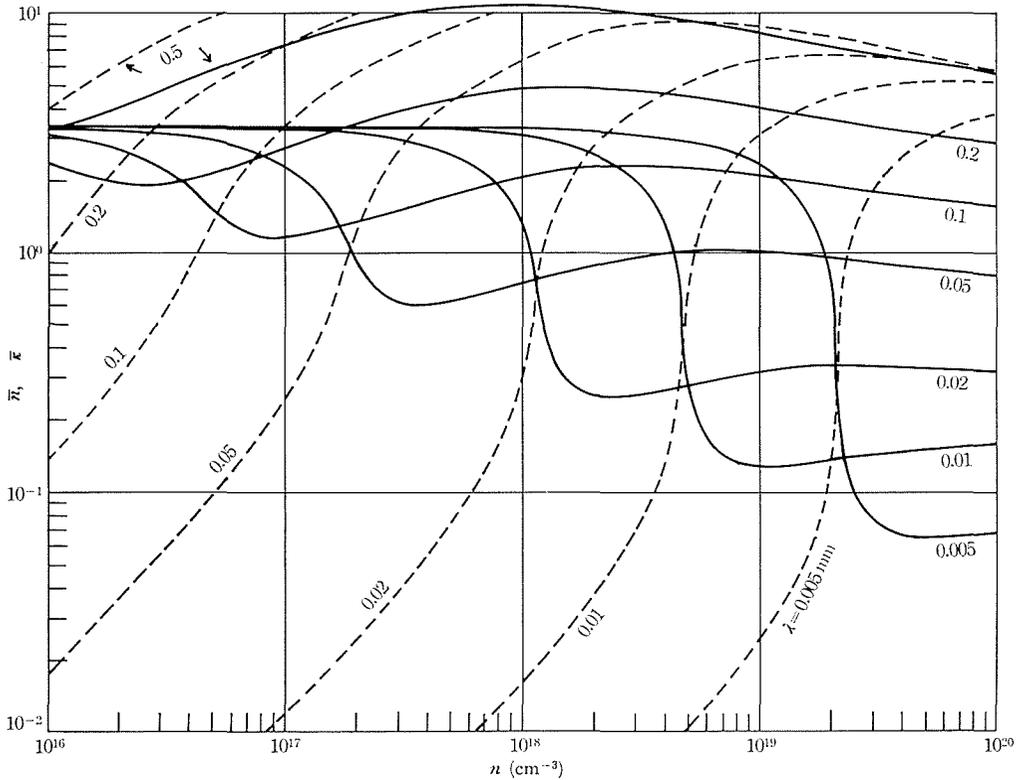


図2 (c) I形高注入シリコンの \bar{n} , \bar{k} 対 n 特性 (λ : パラメータ, $T=300^\circ\text{K}$, \bar{n} : 実線, \bar{k} : 破線)

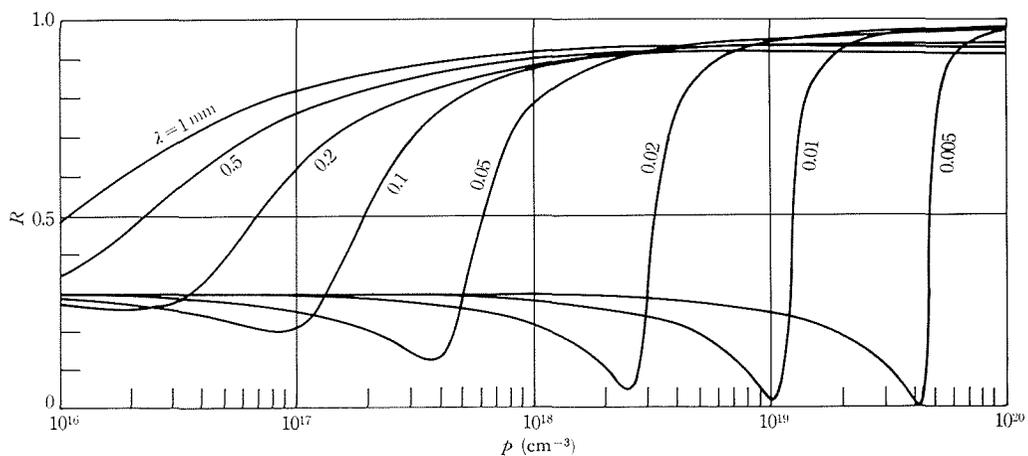


図3 (a) P形シリコンの R 対 p 特性 (λ : パラメータ; $T=300^\circ\text{K}$)

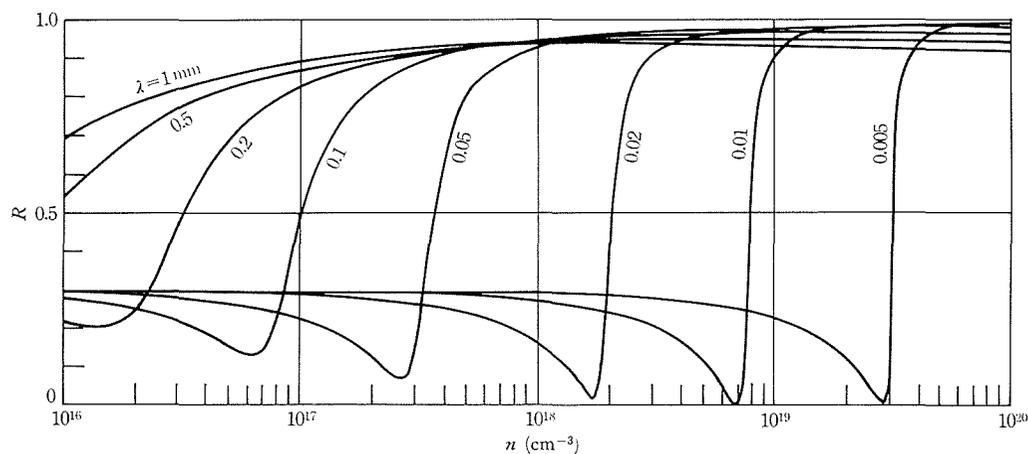


図3 (b) N形シリコンの R 対 n 特性 (λ : パラメータ; $T=300^\circ\text{K}$)

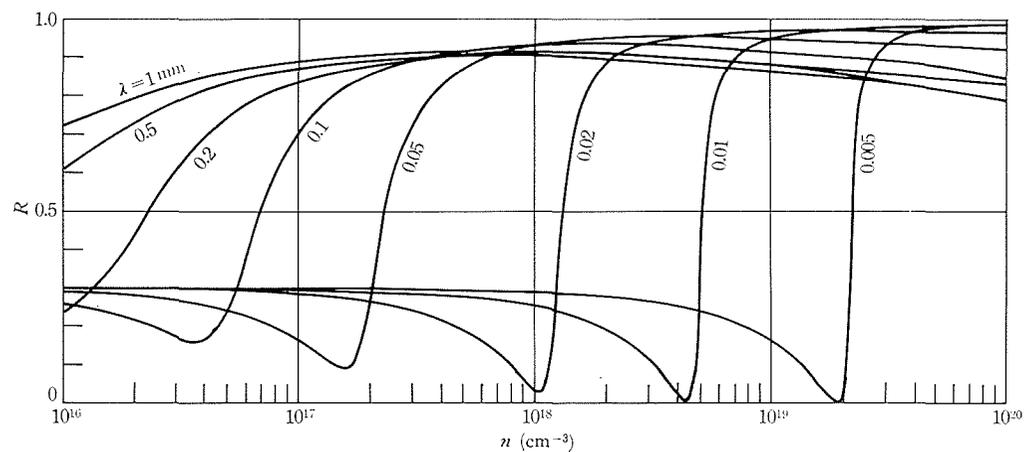


図3 (c) I形高注入シリコンの R 対 n 特性 (λ : パラメータ; $T=300^\circ\text{K}$)

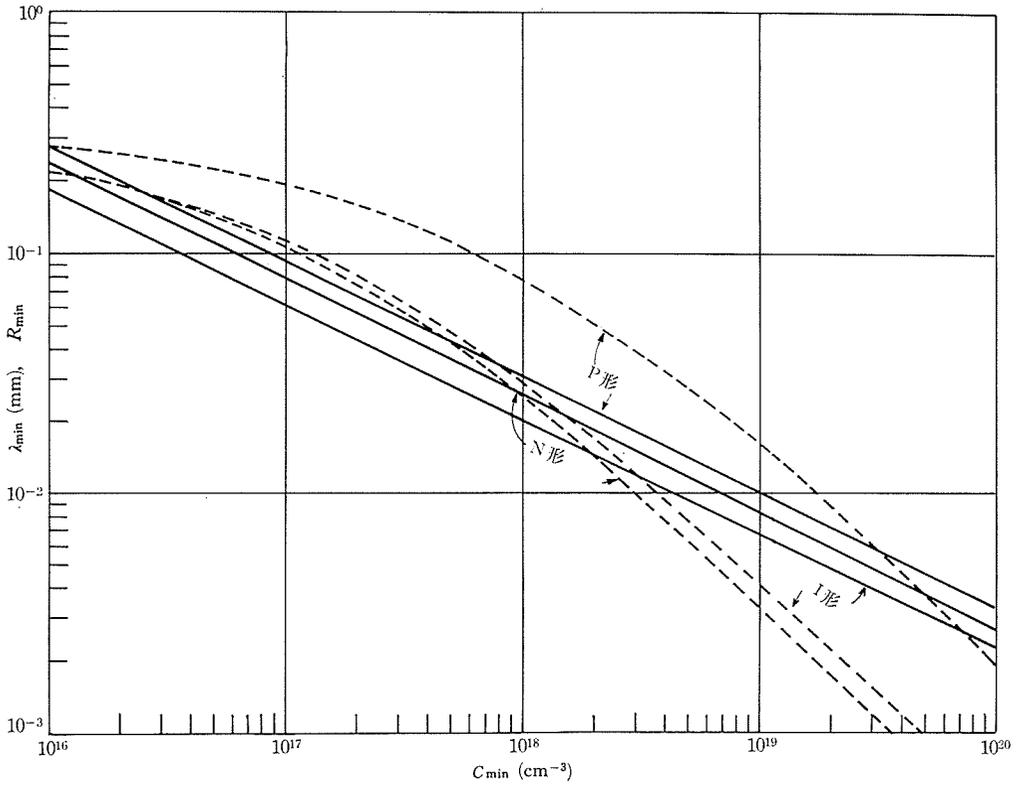


図4 R 最小時の R_{min} , λ_{min} 対 C_{min} 特性 (λ_{min} : 実線, R_{min} : 破線)

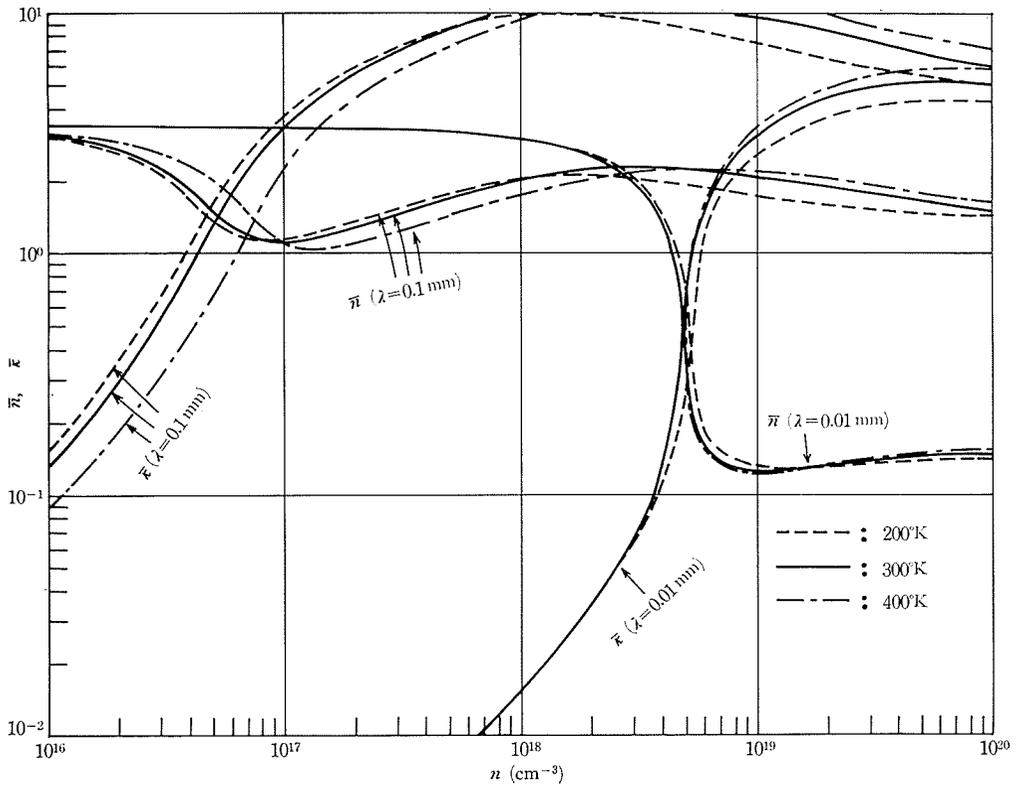


図5 (a) I 形高注入シリコンの \bar{n} , \bar{k} 対 n 特性 (λ および T : パラメータ)

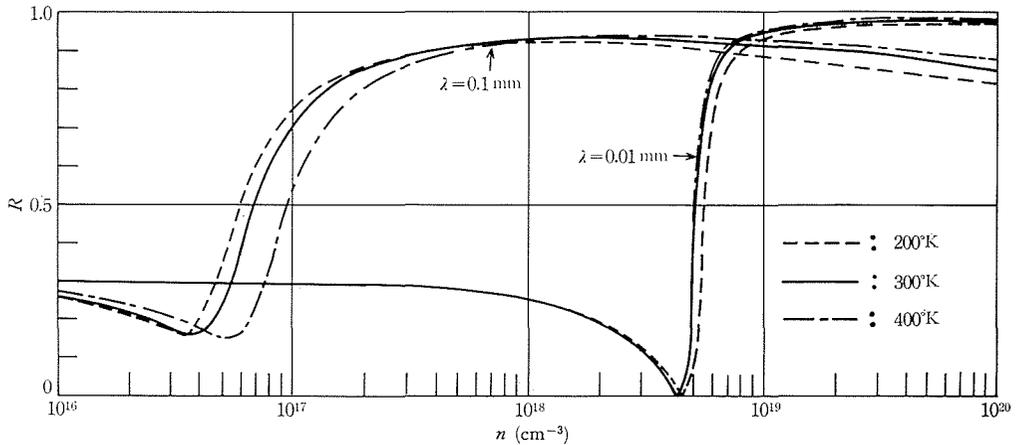


図5(b) I形高注入シリコンの R 対 n 特性 (λ および T : パラメータ)

λ に対し $c < c_{\min}$ では \bar{n} の影響は小さく半導体は誘電体的であるが、 $c > c_{\min}$ では \bar{n} の影響が強く金属的である。後者では吸収によって反射率が変調され、反射変調と呼ばれている。短波長側では $c > c_{\min}$ で急激に R が増加し 100% 近くの全反射になるが、長波長側では R の増加の傾向はゆるく、また全反射的でなくなる。 λ_{\min} については文献5)のような実測があるが、その特性は図4と大体似ている。

\bar{n} , $\bar{\kappa}$ の温度変化は、200~400°K の温度範囲に対し、P形ではほとんど無く、N形では僅かにあり、さらにI形高注入では多少あって特に長波長側で大きい。図5(a)にI形高注入の場合で、 $\lambda=0.01, 0.1$ mmの2種について \bar{n} , $\bar{\kappa}$ の温度変化を示す。 $\lambda=0.1$ mmの場合、特に高温側で変化が大きい。同図(b)に R の特性を示す。これらの図より、I形高注入の場合でもサブミリ波側では温度変化を考慮する必要があるが、赤外線側ではほとんど問題にしなくてもよいことがわかる。

6. 結 論

ローレンツの理論を使って赤外線よりサブミリ波領域にかけてのシリコンの複素屈折率と波長、キャリア濃度および温度との関係を移動度に充分の考慮をはらって解析した。数値解析の結果得られた主な結論は

- プラズマ端反射点が存在する。
- プラズマ端反射点に近づくに従い屈折率は減少して極小点に達する。短波長ほどその減少の割合が大きい。屈折率の極小点を境にして減衰係数が急増し、やはり短波長ほどその増加の割合が大きい。
- 同一キャリア濃度に対し短波長ほど導電率は小さい。しかし波長が1 mm程度に長くなると直流の導電率とほとんど変わらず波長特性を有しなくなる。
- 一定波長に対し反射率 R を最小にするキャリア濃度 c_{\min} が存在し、 $c < c_{\min}$ のキャリア濃度に対し誘電的、 $c > c_{\min}$ に対し金属的性質を有する(図4の λ_{\min} 曲線の下側が誘電的、上側が金属的)。特に短波長側では c_{\min} より大きいキャリア濃度に対し R は急激に増加し、ほぼ100%の全反射となる。しかし長波長側ではこの傾向は弱く、全反射には達しない。
- 200~400°K の温度範囲では、 \bar{n} , $\bar{\kappa}$ の温度変化はP形ではほとんど無く、N形では僅かにある。I形高注入では多少あり、とくに長波長側(サブミリ)波側でその影響が大きい。

この論文で展開したローレンツの理論による解析法は、狭いスペクトル吸収のような現象を除けば等極性半導体では一般に通用すると考えられる。しかし化合物半導体では格子振動が一般に複雑な様相を帯びてくるので、このような単純な解析では不十分である。

文 献

- 1) 小川, 西辻: 半導体中の自由キャリアの吸収による CO₂ レーザの変調, 電子通信学会電子デバイス研究会資料, ED 75-27, 1975.
- 2) Salzberg and Villa: J. Opt. Soc. Am, 47, pp. 244, 1957.
- 3) K. Seeger: Semiconductor Physics, Springer-Verlag, pp. 289-290.
- 4) T. Abe and T. Kato: Infrared Reflectivity of N on N⁺ Si wafers, J. J. A. P., Vol. 4, No. 10, pp. 742-751, 1965.
- 5) Phillips and Schumann: IBM Report TR 22, pp. 197, Aug. 1965.