



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	半導体におけるFERMI ENERGYとCARRIER CONCENTRATIONの正確な計算法 (II)
Author(s)	阿部, 寛; Abe, Yutaka
Citation	北海道大學工學部研究報告, 165, 109-114
Issue Date	1993-07-30
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/42375
Type	departmental bulletin paper
File Information	165_109-114.pdf



半導体におけるFERMI ENERGYとCARRIER CONCENTRATIONの 正確な計算法(II)

阿部 寛

(平成5年3月31日受理)

An Exact Numerical method for calculating Fermi Energies and Carrier Concentrations in Semiconductors (II)

Yutaka ABE

(Received March 31, 1993)

Abstract

In this report, we discuss the detailed numerical method for calculating the the Fermi energies and carrier concentrations in various seniconductors. Especially, we treat the following topics; i) the temperature dependence of electron concentrations in heavily compensated n-type Si, ii) effect of variation in ionization energy of shallow impurities on the carrier concentrations and iii) the effect of band nonparabolicity on the density-of-state in narrow-gap semiconductores.

1. はじめに

半導体におけるFERMI ENERGYとCARRIER CONCENTRATIONの正確な計算法(I)¹⁾において, carrier concentration の温度依存性の計算における問題点の指摘と基本的な数値計算の手法について議論した。実際の数値計算においては, 特にp-type 半導体の場合にFermi energy の温度変化が大きいため, hole 濃度 p にたいする積分方程式

$$p = N_v \vartheta_{1/2}(-\epsilon_g - \eta)$$

の解の収束が悪くなるので, 積分区間の設定に注意し発散解を防止することが必要である。この点に注意すれば, 満足すべき正確な解が常に得られる。

本報告では, (I)で詳細に触れなかった以下の三点について議論する;

- 1) 補償度の大きな半導体におけるcarrier concentration の温度依存性の解析,
- 2) 浅い不純物のイオン化エネルギーの濃度依存性,
- 3) 狭いエネルギーギャップを持つ半導体のband nonparabolicity の効果。

2. 補償度されたSi のFERMI ENERGY とCARRIER CONCENTRATIONS

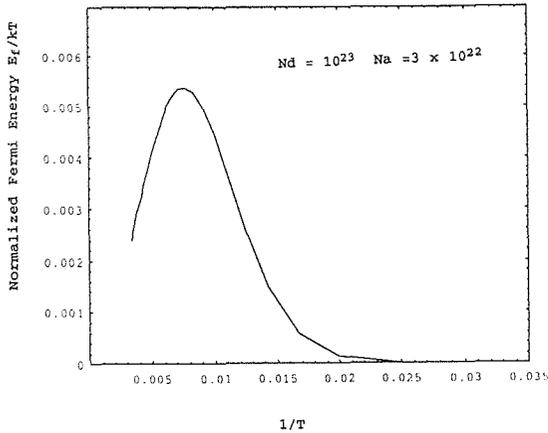
浅いdonor と浅いacceptor を含む半導体のFermi energy は

$$f(\eta) = N_c \vartheta_{1/2}(\eta) - N_d^+ - N_v \vartheta_{1/2}(-\epsilon_g - \eta) + N_a^+ \equiv 0 \tag{2.1}$$

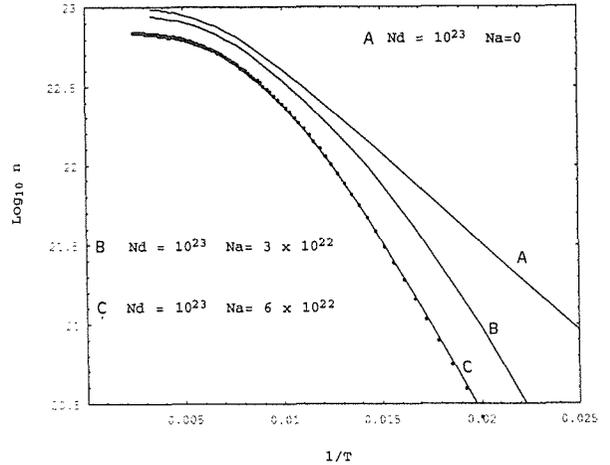
によって決められる。ここで

$$N_d^+ = N_d - N_d \{1 + (1/g_c) \exp [(E_d - E_F)/kT]\}^{-1} \tag{2.2}$$

$$N_a^+ = N_a - N_a \{1 + (1/g_v) \exp [(E_F - E_a)/kT]\}^{-1} \tag{2.3}$$



第 1 図(a) 補償された n-type Si の Fermi energy の温度依存性。(濃度の単位: m^{-3}).



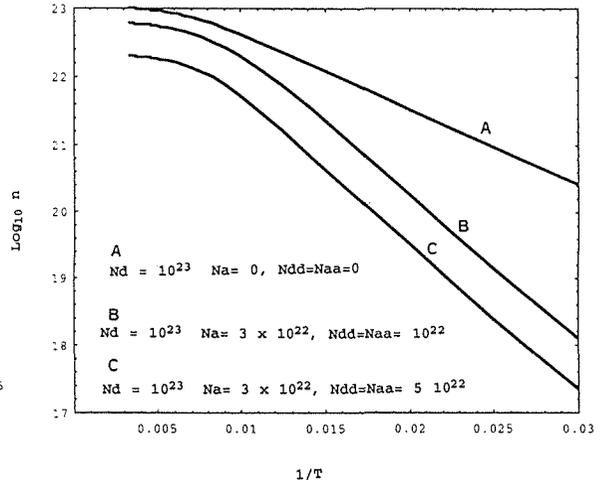
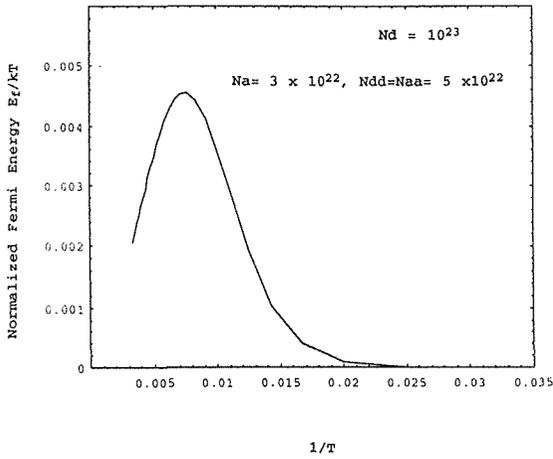
第 1 図(b) 補償された n-type Si の電子濃度の温度依存性。(濃度の単位: m^{-3}).

で, E_d , E_a はそれぞれ浅い donor, acceptor の準位, g_c , g_v はそれらの準位の縮退度を表す。第 1 図(a), (b) は, Si に Sb と B が dope されている場合の Fermi energy, および電子濃度の温度依存性をしめたものである。補償された不純物のために 100 k 付近から急激に Fermi energy が低下している。電子濃度分布が nondegenerate な場合には, 部分的に補償された n-type 半導体の電子濃度は, (2.1) 式を Fermi 関数が伝導帯や充満帯で 1 より十分に小さくなることを考慮すれば近似的に

$$n = [\{N_a^2 - 2N_a q + 4N_d q + q^2\}^{1/2} - (N_a + q)] / 2$$

で与えられる。ここで, $q = (1/2) N_c \exp [-E_d/kT]$ である。第 1 図 (b) の点線はこの近似値をしめたもので, 比較的よい近似となっていることが理解される。ここで, 低温領域において補償されていない場合に比較して, 明瞭な activation energy の違いが発生していることに注意すべきである。今, ある Si の単結晶試料がもともとあるとして, この試料にどのような不純物が導入されているのか分からないとしよう。試料は比較的良質で深い準位は含まれていないと仮定しよう。どの程度の浅い不純物を取り込まれているかを実験的に評価するには, 電気伝導度と Hall 効果の温度依存性からキャリア濃度の温度依存性を導出して, これを評価しなければならない。そのときには, 以上で述べた activation energy の温度領域による変化は, 含まれる不純物の同定に大変重要な役割をはたすことは, 容易に想像がつくであろう。さて, 以上の議論で見かけ上完全に半導体の Fermi energy は決定できた様に思われる。

Band gap 内に多数の深い準位が含まれている場合でも基本的には, いままでの議論を単純に拡張することによってキャリア濃度を決定することが出来る。勿論, 数値計算自体は複雑になるので, 解の収束にたいする注意はより厳しいものになるのは当然である。



第2図(a) 深い不純物レベルを作るAuを含むSiにおけるFermi energy の温度依存性。
(濃度の単位: m^{-3}).

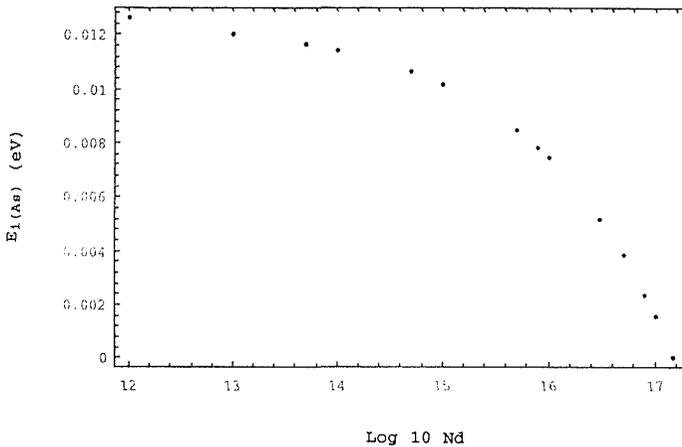
第2図(b) Auを含むSiの電子濃度の温度依存性。
(濃度の単位: m^{-3}).

第2図(a), (b) は, 第1図に示した系に更に深い二重不純物準位を作る Au をdope した場合の Fermi energy, 電子濃度の温度変化を示したものである。図より低温領域で, 浅い不純物の freeze-out が発生していることが分かる。

しかし, ここでもう一つの重要な考慮すべき factor がある。それは, 浅い不純物のイオン化エネルギーは, 不純物の濃度に比例して小さくなり, ある臨界値でゼロになってしまうという点である。これは大変に厄介な問題である。不純物濃度が大きくなると, 隣同志の不純物の波動関数に重なりが発生するであろう。Debye と Conwell²⁾は, GeにおけるAs donor のイオン化エネルギー $E_i(As)$ が

$$E_i(As) = [0.0125 - 2.35 \times 10^{-8} (N_d)^{1/3}] \text{ (eV)} \tag{2.4}$$

で変化することを見いだしている。ここで, N_{di} は, As donor のうちイオン化しているものの濃度を表す(第3図)。イオン化不純物濃度が $10^{21} (m^{-3})$ を越える辺りから急激にイオン化エネルギーが低下するので, それに伴い伝導帯の電子濃度も変化することになる。



第3図 GeにおけるAs のイオン化エネルギーの濃度依存性。濃度の単位: cm^{-3} 。

3. Narrow-Gap Semiconductors におけるCarrier分布

InSb, InAs, HgTe といった狭い energy-gapを持つ半導体あるいは半金属の伝導帯は、その直下の充満帯との相互作用が非常に強いために、Si, Geにみられる様な単純な quadratic dispersion を持たない。k-p perturbation⁸⁾ による伝導帯の energy Eは、

$$E = (\hbar^2 k^2 / 2m_0) + (1/2) (\xi - E_g) \quad (3.1a)$$

$$\xi = (E_g^2 + 8\hbar^2 p^2 / 3)^{1/2} \quad (3.1b)$$

であたえられる。ここで、Pは伝導帯の s-wavefunction と充満帯の p-wavefunction の間の運動量マトリックス要素である。0 Kにおけるenergy-gap, effective density-of-state massを夫々 E_g^* , m_n とすると、伝導帯の状態密度は、

$$\rho dE = (2E_g^*)^{1/2} m_n^{3/2} \lambda(x) dE / 8\pi^3 \quad (3.2a),$$

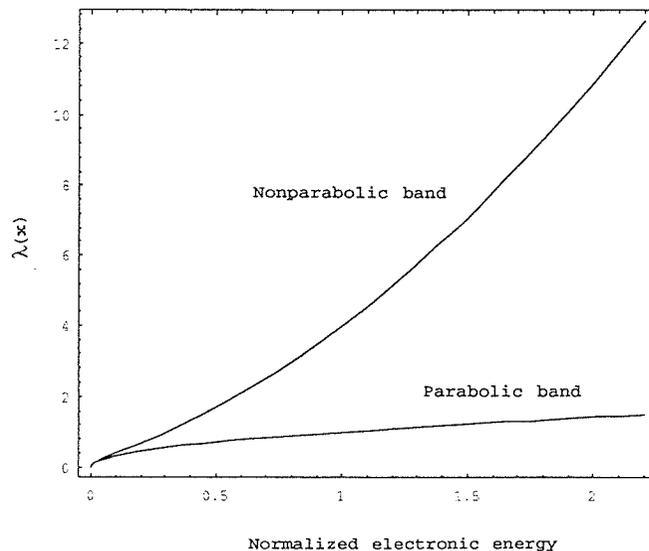
$$\lambda(x) = [x(1+x)]^{1/2} [1 + (2-5\mu)x - 8\mu x^2], \quad x = E/E_g^* \quad (3.2b)$$

で与えられる。ここで μ は effective mass ratio m_n/m_0 を表す。伝導帯の電子濃度 n は、式(3.2 a) より

$$n = (1/2\pi^2) (2m_n kT)^{3/2} F \quad (3.3a)$$

$$F = \vartheta_{1/2}(\eta) + \beta(5/2 - 5\mu) \vartheta_{3/2}(\eta) + \beta^2(1 - 21\mu/2) \vartheta_{5/2}(\eta) - 4\mu\beta^3 \vartheta_{7/2}(\eta), \quad \beta = kT/E_g^* \quad (3.3b)$$

で与えられうことになる。ここで、 $\vartheta_n(\eta)$ n 次の Fermi 積分である。この計算は effective mass ratio について一次の項まで考慮した近似計算であるが、大体600 K以下の温度では、10%以下の精度で n の解を得ることが可能である。第4図は InSb における $\lambda(x)$ を示したものであるが、これは状態密度に比例した量であるので、InSb における伝導帯の nonparabolicity を直接反映する量と考えることが出来よう。



第4図 InSbにおけるnonparabolic band のエネルギー依存性。

GaAs, InP GaAs 等の比較的energy-gap の大きな半導体では、熱平衡状態に近い電子状態の議論では nonparabolic band の効果はこれを無視してもよいが、これらの半導体は hot electron といったエネルギーの高い電子群を利用するデバイスの考察が最近多くなっているため、その場合には当然ながら、nonparabolic band を考慮しなければならない。

k, p perturbation によるこの場合の伝導帯のenergy dispersion relation は、

$$E = (\hbar^2 k^2 / 2m_0) + [1 + 8m_0 p^2 k^2 / 2m_0 E_g^{*2}]^{1/2} - 1 \quad (3.4)$$

で近似される。(k に関する四次までの展開。) この場合、電子濃度 n は、

$$n = (1/2\pi^2) (2m_n kT / \hbar^3)^{3/2} F, \quad (3.5a)$$

$$F_2 = \mathcal{F}_{1/2}(\eta) + (5/2) (kT/E_g^*) (1 - m_n/m_0)^2 \mathcal{F}_{3/2}(\eta) \quad (3.5b)$$

で与えられることになる。これらの半導体は、一般に多数の伝導帯 minimum を持っており、特に GaSb では、主伝導帯とこれらのサテライト帯とのエネルギー差が小さいので、それらを全て考慮にいれたキャリアのエネルギー分布を最初から考える必要がある。

4. まとめ

いままで多くの半導体の教科書やあるいは半導体 electronics の講義の現場で曖昧に取り扱われていた半導体中のキャリアのエネルギー分布の正確な評価法について、再検討した結果を述べてきた。(I) および今回の報告に見られる様に、半導体中のキャリアの分布は、問題にする半導体の固有な energy band の特性を強く反映しており、それを十分に理解した上でキャリア分布の計算を実行しなければならない。そのためには、半導体の band 構造にたいする十分な理解が大前提となることは言うまでもないが、現状は一般にこれが満たされているとはいいがたい。(I), および本報告においては、各半導体のどのような固有の band 構造が、どの程度の不純物濃度あるいは温度領域で、具体的にどの程度の効果を示すかという点を明らかにした。その主要点は、次の通りである；

1) energy-gap がキャリアの thermal energy に比べて十分に大きな半導体 (1 eV あるいはそれ以上の半導体) においては、浅い不純物濃度が 10^{17}cm^{-3} 以下の場合、とくに 10K 以下の低温領域を除けば、不純物イオン化エネルギー一定の仮定にもとづく単純な積分方程式によって、その Fermi energy が一義的に決定される。

2) 不純物濃度が 1) よりも大きい場合には、不純物原子の波動関数の重なりと、不純物 potential の揺らぎによる band 端の tailing によるイオン化エネルギーの低下と、極低温領域での局在の問題が発生する。従って、この領域ではこれらを正しく考慮したキャリア分布を考察しなければならない。

3) 狭い gap を持つ半導体では、伝導帯の nonparabolic dispersion をキャリア濃度の全ての領域で正しく評価しなければならない。又、energy-gap の大きな化合物半導体であっても、hot electrons, hot holes を問題にするときには、この nonparabolicity や multiple band 構造における各 band minimum のキャリア分布を全て考慮にいれる必要がある。後者は、特に新しい半導体 device の考察において不可欠な条件になる。

参考文献

- 1) 阿部 寛, 北大工学部研究報告, 161, (1992) 39.
- 2) T. Debye and E. M. Conwell, Phys. Rev., 93, (1954), 693.
- 3) E. O. Kane, Phys. Rev., 131, (1963), 79.