

GaAs 中の電子輸送におけるキャリア間 相互作用の効果の解析

正宗 綾子, 星野恵美子, 吉井 彰
日本女子大学理学研究科数理・物性構造科学専攻

(2002年12月16日受理)

概 要 p-GaAs 中における電子の輸送現象のモンテ・カルロ法によるシミュレーションを行った。本シミュレーションにおいては、電子のみならずホール輸送に関してもモンテ・カルロ計算を行い、印加電場に対するホールの分布関数を計算し、この分布関数を電子-ホール散乱の散乱頻度計算に導入することで電子輸送におけるホールとの相互作用の効果を取り入れた。この計算結果を実測データと比較し、キャリア間の散乱効果を精密に導入することにより、実測データと良い一致が得られることを示した。

1. はじめに

20 世紀末から社会の情報化が急速に進展し、われわれの生活にも大きな変革をもたらしている。その 1 つはパソコンの普及であり、ダウンサイジングというコンピュータの小型・高性能化・低価格が進み、ワークステーションやパソコンが社会の隅々まで導入され利用されている。また、通信技術の進展も著しく、携帯電話を中心とするモバイル通信の普及も目覚ましいものがあり、ADSL 技術の開発など通信路のブロードバンド化が進められ、コンピュータと通信の進展が相俟って今日の情報化社会の基礎となっている。このような情報化の進展には多くの要素技術の寄与が必要であったが、中でも半導体技術は極めて大きな役割を果たしている。すなわち、半導体は 1940 年代半ばの Shockley, Bardeen, Brattain によるトランジスタの発明に始まり、1950 年代末の Kilby らによる IC 技術の開発などを基礎に、LSI, VLSI, ULSI と進展し、今日のエレクトロニクス社会を支える中心のデバイスとなっている。現在の超 LSI では 1 チップに数千万個ものトランジスタなどのデバイスが搭載され、その動作速度もナノからピコ秒のオーダーに達している。このような LSI の高性能化（高速・高集積化）の最も大きな要因の 1 つは微細加工技術の進展である。シリコンを中心とする微細加工技術の進展により、1990 年代に入って 1 ミクロンを切る加工技術が実現し、1990 年代末からはディープサブミクロンとして 0.25 ミクロンから更に

0.18 ミクロンへと進展し、2010 年頃には 100 ナノメートルに達するものと考えられている。このように LSI の微細化は少し翳りを見せながらも着実に進展し、ナノテクとして現在も精力的に研究が進められている。

半導体デバイスの微細化はスケールリング則に基づき進められてきた。デバイスサイズの縮小により半導体内部の電界が増加する。内部電界の増加はパンチスルーやインパクトイオン化の増加を招きデバイス特性の劣化を生ずることから、これを抑えるためにドーピングの不純物の濃度を上げることが必要になり、微細デバイスの作製には高濃度不純物が重要になっている。この不純物ドーピングの高濃度化は必然的に狭い領域に多くのキャリアや不純物を含むことから、キャリア間やキャリアと不純物との間の散乱の増加をもたらすことになる。キャリア間の散乱効果は本質的に多体効果であり、それを厳密に評価することは極めて困難な課題であった。

半導体デバイスの電気的な特性を求めるためには、半導体中のキャリア輸送現象の解析がその基礎となる。半導体デバイスの微細化に伴い、より精密な輸送解析が必要になってきた。半導体中のキャリアの輸送現象の精密な解析を行う有力な手段としてモンテ・カルロ法によるシミュレーションが開発され広く活用されている^{1,2)}。このモンテ・カルロ法に基づく計算はミクロな種々の散乱現象を精密に取り扱うことが可能なことから、微細領域での電子の運動を精密に評価する手段として極めて有効であり、特に従来の解析的な手法や近似計算では取り扱うことが困難であった高電界での現象を中心にシリコンや様々な化合物半導体中での電子輸送の研究が精力的

Contribution No.: MP 02-3

に展開されている。しかしながら、モンテ・カルロ計算は分布関数の時間・空間発展を記述するボルツマン方程式を間接的に解くものであり、分布関数に依存するキャリア間散乱を含む解析を直接行うことは困難であった。1970 年代末から 1980 年代に入り、このキャリア間散乱をモンテ・カルロ計算に導入する幾つかの手法が開発され、主として電子-電子散乱の効果の輸送特性への影響の検討が開始された^{3, 4)}。半導体におけるキャリアとして電子とホールがあるが、電子の移動度がホールに比べて高いために半導体デバイスの特性を担うキャリアとしては電子が利用されることが多く、電子の半導体中での輸送現象が主に研究されており、ホールに関する輸送現象の解析は現状では必ずしも十分ではない。また、高濃度不純物を含む半導体中では電子およびホールともに高濃度であり、電子とホールの間の相互作用もそれぞれのキャリアの輸送特性に大きな影響を与えるために、この電子-ホール相互作用の精密な解析も重要になってくる⁵⁾。

半導体中でのキャリアの振る舞いは極めて高速な現象であり、それを直接観測することはこれまでは非常に困難な課題であった。しかしながら、今日のピコ秒レーザやフェムト秒レーザを中心とする超高速光パルスレーザ技術の進展は、半導体中でのキャリアのドリフト速度や、エネルギー状態などの直接測定を可能にし、これらのデータが化合物半導体を中心に得られつつある^{6, 7)}。そこで本研究では、GaAs における電子の輸送現象をドリフト速度を中心にシミュレーションと実測データの比較検討を行った。この中で、電子間散乱および電子-ホール散乱モデルのモンテ・カルロ計算への導入を進め、これらの散乱の電子輸送への影響を評価した。特に、TOF (Time of flight) 法による p 型 GaAs における電子のドリフト速度の実測データおよび和周波混合法による電子のエネルギー緩和過程の測定データをもとに高濃度半導体におけるキャリア間散乱の重要性を明らかにした。すなわち、p-GaAs 中で電子は多数キャリアであるホールと強く相互作用をするために、電子の輸送解析においてこの電子-ホール相互作用を精密に導入することが必要である。そのための手法として従来行われていた電子輸送解析のみならず、ホールに対するモンテ・カルロ法による輸送解析プログラムを作成し、これを用いて印加電場に対するホールの分布を計算し、その結果を電子輸送のモンテ・カルロ計算に反映することで実測データとの良い一致が得られることを示した。以下、第 2 章では計算手法の概要を、第 3 章では幾つかの濃度の p 型 GaAs における電子のドリフト速度の実測データと 2 章で述べる手法に基づく計算結果との比較ならびに考察を示す。

2. 計 算 法

2. 1. 電子の散乱モデル

モンテ・カルロ法によるキャリアの輸送特性のシミュレーションにおいてその精度を決める最も重要な要素は散乱である。キャリアは半導体中で運動するとき種々の散乱体と相互作用をする。散乱体としては格子原子、不純物、他のキャリアなどが考えられ、これらとの相互作用を量子力学に基づきモデル化してシミュレーションに導入することが必要である。電子の格子による散乱は音響フォノン散乱と極光学フォノン散乱を考慮し、それぞれバレー内、バレー間の散乱に対して現在標準として用いられているモデルを用いた。電子のコンダクションバンドのモデルとしては、 Γ , X, L の 3 バレーモデルを用いた。不純物による散乱はイオン化した不純物によるクーロンポテンシャルによる散乱を考えた。クーロンポテンシャルは長距離力であることからそのままでは散乱断面積に発散が生じる。この発散を防ぐモデルとしては、現在 Conwell-Weisskopf によるものと Brooks-Herring によるモデルがある⁸⁾。前者は半導体中における不純物間の平均距離を考慮した切断パラメータを導入することにより断面積計算の積分を有限にするものである。これに対して、Brooks-Herring モデルはポテンシャルとして、次のようなダンピング項を含む湯川型を用いるものである。

$$V(r) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon\gamma} \exp(-r/\lambda) \quad (1)$$

ここで λ はスクリーニング長でこれはキャリアのスクリーニング効果により決まる。すなわち、半導体中には可動キャリアが存在するためにこの可動キャリアが固定されたイオンの周りに集まりイオンの電荷を見かけ上その中心から離れるに従って急速に減少させ、その結果散乱断面積の発散を防ぐことができるものである。可動キャリアの分布は温度に大きく依存するために、スクリーニングの効果も温度依存性を有する。不純物散乱の温度依存性を考慮するためにはこのスクリーニング効果の導入が必要であり、ここでは Brooks-Herring モデルを用いた。スクリーニング長 λ は Debye モデルと Thomas-Fermi モデルが用いられている。一般的に Debye モデルはキャリア密度が余り高くない場合に有効であり、Thomas-Fermi モデルは逆にキャリアの密度が十分高いときに有効である。そこで、ここでは高濃度不純物散乱の効果精密に取り扱うことが必要であることから、スクリーニングモデルとして後者の Thomas-Fermi モデルを用いた。

2. 2. ホールの散乱モデル⁹⁾

ホールの散乱機構を考えるときに、そのバンド構造が重要である。ホールは Γ 点に縮退した maxima をもつ 3 つのバンドを有している。その中の 1 つはスピン・軌道結合によるものであり他の 2 つのバンドより低いエネルギー位置にあるので、ここでは残りの 2 つのバンドを考慮した。この 2 つのバンドにおいてはホールの有効質量が異なり、重い方がヘビーホールバンド、軽い方がライトホールバンドである。ホールの散乱機構としては、フォノン散乱とイオン化不純物散乱を導入した。フォノン散乱については、極光学フォノン散乱の散乱頻度は

$$S_{op}(\vec{k}) = \frac{e^2 \omega_0 m_f}{4\pi \epsilon_0 \hbar^2} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \frac{\Psi H}{k_i} (N_0 + 1/2 \pm 1/2) \quad (2)$$

で与えられる。

ここで、 m_f は終状態のバンドにおける有効質量、 k_i は始状態のバンドでのホールの波数、 N_0 は光学フォノンの占有数で Bose-Einstein 関数で与えられる。また、式の中の複号±の+はフォノンの放出に、-は吸収に対応する。極光学フォノン散乱に対してはヘビー、ライトのバンド内散乱およびヘビー、ライトのバンド間散乱があり、それぞれの散乱頻度は式 (2) において、 H の項を前者に対しては

$$H^{intra} = [1 + 3\phi(\phi - \Psi^{-1})]/4$$

を、後者のバンド散乱に対しては

$$H^{intra} = 3[1 - \phi(\phi - \Psi^{-1})]/4$$

を用いた。但し、 $\phi = (k_i^2 + k_f^2)/2k_i k_f$ であり、 $\Psi = \ln |(k_i + k_f)/(k_i - k_f)|$ である。非極光学フォノン散乱ならびに不純物散乱に関しても極光学フォノン散乱と同様にバンド内散乱とヘビー・ライトのバンド間散乱を考慮した。

2. 3. キャリア間散乱モデル

キャリア間の散乱はクーロンポテンシャルによるものであることから、計算の基礎は不純物散乱の場合と似ている。しかしながら、不純物散乱が固定電荷によるものであるのに対して、キャリア間の散乱は散乱の相手のキャリアが可動であり様々な状態をもつという点で問題はより複雑になっている。キャリア間の散乱のもとになるポテンシャルは (1) 式で表される不純物散乱と同様に遮蔽されたクーロンポテンシャルとすると、初期状態 \vec{k}_0 、 \vec{k} の 2 つのキャリアが衝突し、終状態 \vec{k}'_0 、 \vec{k}' になる遷移確率は

$$S_{\vec{k}_0, \vec{k} \rightarrow \vec{k}'_0, \vec{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 f_{\vec{k}_0} f_{\vec{k}} (1 - f_{\vec{k}'_0}) (1 - f_{\vec{k}'}) \delta(\mathbf{E}_{\vec{k}_0} + \mathbf{E}_{\vec{k}} - \mathbf{E}_{\vec{k}'_0} - \mathbf{E}_{\vec{k}'}) \quad (3)$$

である。

M は散乱の行列要素であり

$$M = \langle \vec{k}_0, \vec{k} | V(r) | \vec{k}'_0, \vec{k}' \rangle = \frac{e^2}{V\epsilon} \frac{\delta_{\vec{k}_0 + \vec{k}, \vec{k}'_0 + \vec{k}'}}{|\vec{k}'_0 - \vec{k}_0|^2 + \beta^2} \quad (4)$$

と表され、 $\delta(\vec{k}_0 + \vec{k}, \vec{k}'_0 + \vec{k}')$ は Dirac のデルタ関数でエネルギー保存を示している。

ここで、 β はスクリーニング長の逆数 ($\beta = 1/\lambda$) であり、 $f_{\vec{k}_0}$ 、 $f_{\vec{k}}$ は初期状態、 $f_{\vec{k}'_0}$ 、 $f_{\vec{k}'}$ は終状態のキャリアの分布関数である。従って、 $f_{\vec{k}_0}$ の状態の入射キャリアに対するキャリア間散乱の頻度は (3) 式の $S_{\vec{k}_0, \vec{k} \rightarrow \vec{k}'_0, \vec{k}'}$ を \vec{k}'_0 、 \vec{k}' に関して積分することで求められる。この積分を実行するに当たってはそれぞれのキャリアの分布関数 $f_{\vec{k}_0}$ 、 $f_{\vec{k}}$ 、 $f_{\vec{k}'_0}$ 、 $f_{\vec{k}'}$ が必要である。しかしながら、この分布関数の形状はこの計算の過程において明示的には与えられていないので、この積分を直接実行することは不可能である。そこで、Lugli-Ferry³⁾ や Osman-Ferry¹⁰⁾ らの方法を導入した。すなわち、波数依存の物理量 $G(\mathbf{k})$ のアンサンブル平均 $\langle G(\mathbf{k}) \rangle$ は、このアンサンブルを構成する個々の要素のミクロスコピックな値 $G_i(\mathbf{k})$ を用いて次の計算式で計算できるということを利用する。

$$\langle G(\mathbf{k}) \rangle = \int d^3k G(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N G_i(\mathbf{k}) \quad (5)$$

ここで、 N はアンサンブルを構成する要素数である。これを用いると多粒子系のモンテ・カルロ計算において、電子間散乱の頻度を計算するためには電子系の自分以外の電子に対する $G_i(\mathbf{k})$ の相加平均をとれば、その分布を考慮した積分が実行できることになる。このような計算を電子間、ホール間および電子-ホール間で計算するとそれぞれの散乱頻度が得られる。以上の過程を電子間散乱に適用すると電子間散乱頻度は

$$S_{e-e}(\vec{k}_0) = \frac{n_e m_e e^4}{4\pi \hbar^3 \epsilon^2} \frac{1}{N_e} \sum_{\vec{k}} \frac{|\vec{k}_0 - \vec{k}|}{\beta^2 (|\vec{k}_0 - \vec{k}|^2 + \beta^2)} \quad (6)$$

となる。

ホール間散乱の頻度 $S_{e-e}(\vec{k}_0)$ は式 (6) において $m_e \rightarrow m_h$ 、 $n_e \rightarrow m_h$ 、 $N_e \rightarrow N_h$ と置き換えることで得られる。電子-ホール散乱に対しては

$$S_{e-h}(\vec{k}_0) = \frac{n_h \mu e^4}{2\pi \hbar^3 \epsilon^2} \frac{1}{N_h} \sum_{holes} \frac{g}{\beta^2 (g^2 + \beta^2)} \quad (7)$$

で与えられる。但し、 $g = 2\mu |\vec{k}_0/m_e - \vec{k}'_0/m_h|$ であり、 μ は電子とホールの 2 体系の還元質量である。ホール-電子散乱に対しては e と h を交換し、全ホールに対する和を全電子にすればよい。

Carrier Independent Parameters	
格子定数 (Å)	5.642
密度 (g/cm^3)	5.32
LO フォノンエネルギー (eV)	0.035
音速 (電子) (cm/s)	5.24×10^3
音速 (ホール) (cm/s)	3.86×10^3
光学的比誘電率	10.92
静的比誘電率	12.53

Carrier Parameters			
Electron			
Parameter	Γ valley	X valley	L valley
音響フォノン変形ポテンシャル (eV)	7.0	9.27	9.20
有効質量	0.063	0.580	0.222
非放物定数 (eV^{-1})	0.061	0.204	0.461
バンドギャップ (eV)	1.439	1.961	1.769
バレー間変形ポテンシャル (eV/cm)			
from Γ valley	0	1×10^9	1×10^9
from X valley	1×10^9	0.5×10^9	0.5×10^9
from L valley	1×10^9	0.5×10^9	1×10^9
バレー間フォノンエネルギー (eV)			
from Γ valley	0	10.0299	0.0278
from X valley	0.0278	0.0293	0.0293
from L valley	0.0278	0.0293	0.0293
等価バレー数	1	3	4

Hole		
Parameter	light hole	heavy hole
光学フォノン結合定数 (eV/cm)	1.2×10^9	
有効質量	0.082	0.45

3. 結果と考察

p 型 GaAs 中での電子のドリフト速度の実測値をもとにシミュレーションとの比較を行った。p-GaAs 中には多数キャリアとしてホールが、少数キャリアとして電子が混在することから、厳密には電子とホールに対するボルツマン方程式を同時に結合して解くことが必要である。しかしながら、この計算は非常に複雑であり、コンピュータの計算時間も極めて長く実用的ではない。そこで、ここでは電子とホールの運動を別々に解き、電子とホールとの相互作用はそれぞれの分布関数が drift-Maxwell 分布をしているとして電子温度、ホール温度を定義し、それぞれの計算の中に相手の温度情報を取り込むことでその結合を近似する方法を採用した。ここで電子およびホールに対するモンテ・カルロ計算に用いたパラメータを上表にまとめて示す。

3. 1. ホールのモンテ・カルロシミュレーション

ここでは電子のドリフト速度を中心に求めることから、ホールとの相互作用を近似的に導入するためにホールの温度が必要であり、そのためにホールの輸送現象のシミュレーションを始めに実行した。図 1 は印加電場をパラメータとしてホールのドリフト速度の時間応答を計算した結果の例である。いずれの印加電場に対しても 0.2ps 程度で平衡速度に達している。図 2 は一様な電場を時刻 $t=0$ で印加し、十分時間が経ちホールがそれぞれの印加電場に対して平衡状態に達した時点でのホールの分布を計算したものである。計算は約 10,000 個のホールの粒子の運動をモンテ・カルロ法により追跡し、2ps 経過した時点でのそれぞれのホールのエネルギーの分布を求めている。電子の場合の分布と異なり比較的きれいなボルツマン分布をしていることが分かる。このプロットの傾きからホール系のそれぞれの電場に対する温度が求められ、

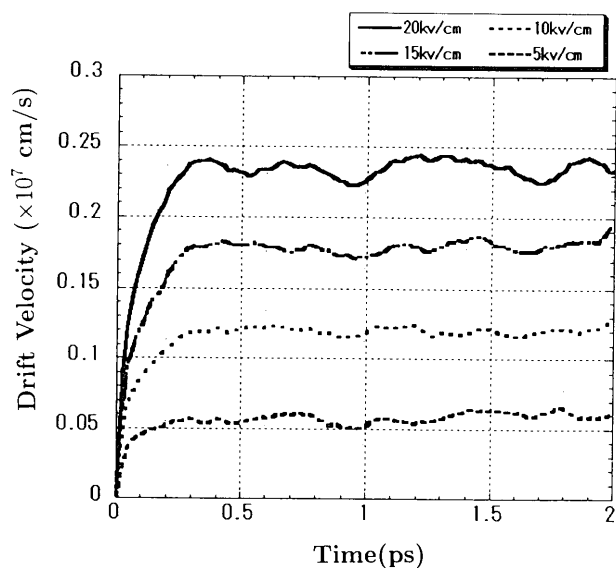


図1. ホールのドリフト速度の過渡応答計算例

5KV/cm から 20KV/cm の電場に対してホール温度は電場による変化はそれ程大きくないが、300K から 500K と印加電場に応じて変化していることが分かる。このグラフをもとにその傾きからホール温度を求め、キャリアの分布を次のような drift-Maxwell 分布で近似してキャリア間の散乱頻度の計算を求めた。

$$f_h(\vec{k}) = \left(\frac{\hbar^2}{2\pi m^* k_B T_h} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{\hbar^2 |\vec{k} - \vec{k}_h|}{2m^* k_B T_h} \right) \quad (8)$$

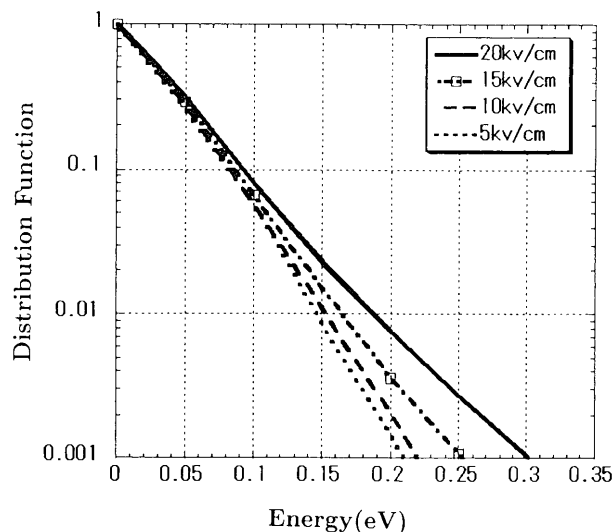
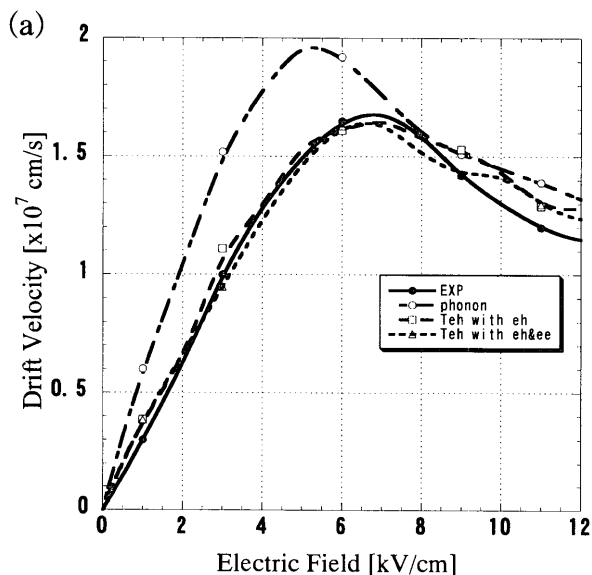


図2. ホールの分布関数の計算例

但し、 $\vec{k}_h = m^* \mu_h \vec{E} / \hbar$ である。

3. 2. 電子のドリフト速度のシミュレーション

図3 (a) は印加電界に対する電子のドリフト速度のシミュレーション結果と実測データとの比較を示している。このときの不純物濃度は $N_A = 1.5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ 、温度は $T = 300\text{K}$ である。図中、実線は実測データであり、破線はそれぞれの条件でのシミュレーション結果を表している。キャリア間の散乱を無視したシミュレーションでは、ドリフト速度は実測データよりもすべての電場に対して大

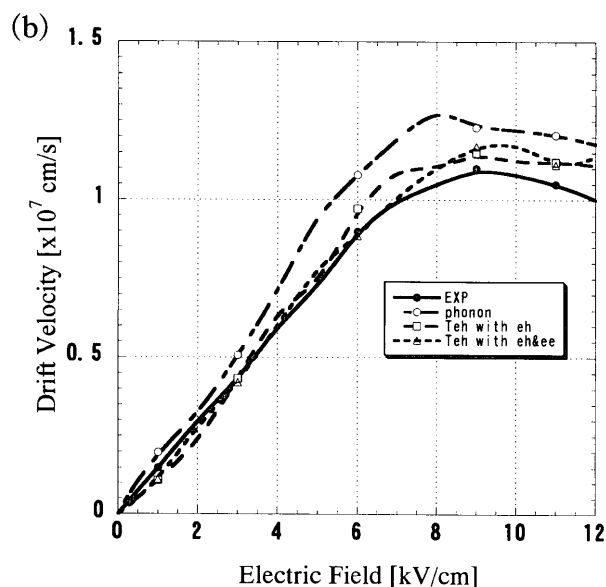


図3. 電場に対する p-GaAs 中での電子のドリフト速度 (ホール温度一定 (300K))

(a) $N_A = 1.5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$

(b) $N_A = 1.5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$

きく、そのずれも極めて大きいことからキャリア間の散乱を無視することは大きな問題を生ずることを示している。これに対して電子-ホール散乱のみ考慮したものならびに電子-ホール散乱と電子-電子散乱の効果を導入した結果は印加電場の低いところではほぼ実測データと一致している。キャリア間散乱が比較的エネルギーの小さいところで多く起こり、エネルギーが高くなると起こり難くなるという性質を有している。したがって、キャリア間散乱がキャリアのエネルギーの上がり難い低電場で支配的であることから、これを導入することで低電場で実測値に近づくことは理解できる。一方、キャリア間の散乱を導入した結果でも高電場では実測データとの差が観測できる。この理由は以下のように考えることができる。このシミュレーションでは印加電場の大きさによらずホール系の温度を室温と等しい 300K に固定した。しかしながら、実際の系では高電場ではホールは電場から大きなエネルギーを得てもう少し広がった分布となり、温度としては高温になっていることが考えられる。この効果がシミュレーションでは電子-ホール散乱を低く見積もることになり、その結果シミュレーションのドリフト速度が高電場で実測データより大きくなっている。図 3 (b) は p-GaAs の不純物濃度を 1 桁上げた $N_A=1.5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ における電子のドリフト速度の実測データとシミュレーションの比較結果である。シミュレーションは図 3 (a) の場合と同様にホールの温度を室温の 300K に固定してある。その結果、図 3 (a) の場合と同様に、例え一定のキャリア温度という近似でもキャリア間の散

乱を導入することで低電場では実測データと比較的良好一致を得るが、高電場では実測データとのギャップが生じている。この場合、不純物の濃度が図 3 (a) の場合より高いためにホール散乱の影響が大きく実測データとのずれが図 3 (a) の場合よりも低い電場で生じていることが分かる。

図 3 (a), (b) の結果から印加電場に対するホールの分布すなわちホール温度の変化が重要であることが示された。この効果を導入するために、それぞれの印加電場に対する電子とホールの分布から電子温度とホール温度を予め求めておき、電子の輸送シミュレーションにおいて電子間散乱ならびに電子-ホール散乱の散乱頻度計算にこの電子温度とホール温度から求まる電子とホールの分布を考慮し、電子の運動を追跡した。すなわち、図 3 (a) および図 3 (b) の計算に対し、それぞれの電場に対するドリフト速度計算において電場に応じて電子温度とホール温度を変化させた。その結果を図 4 (a) および図 4 (b) に示す。図 4 (a) は不純物濃度が $N_A=1.5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ の場合、図 4 (b) は $N_A=1.5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ である。それぞれ電子-ホール散乱を含むもの、電子-ホール散乱と電子-電子散乱の両方を考慮した計算結果と実測データを示している。いずれの場合も、高電場ではキャリア温度の電場依存性を考慮することでドリフト速度が下がり、実測データに近づく傾向を示している。特に、高濃度の図 4 (b) においては電子-ホール散乱に加えて電子-電子散乱を精密に導入することで高電場でのドリフト速度が実測データと良く一致することが示された。

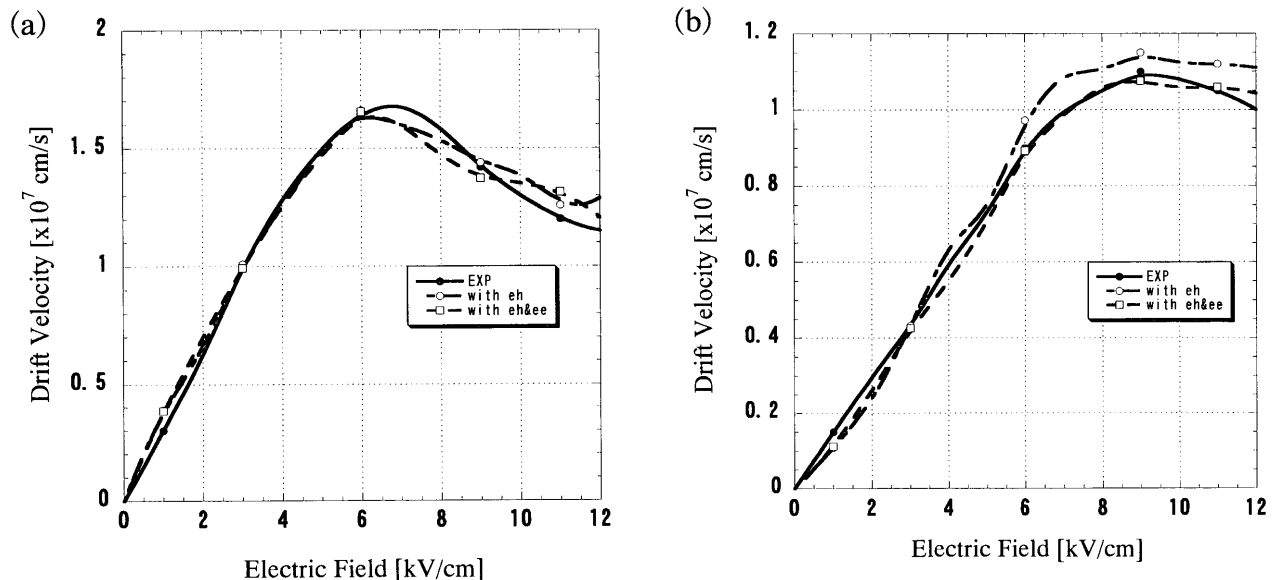


図 4. ホール温度を電場に応じて変化させた場合の電場に対する p-GaAs 中での電子のドリフト速度

(a) $N_A=1.5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$

(b) $N_A=1.5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$

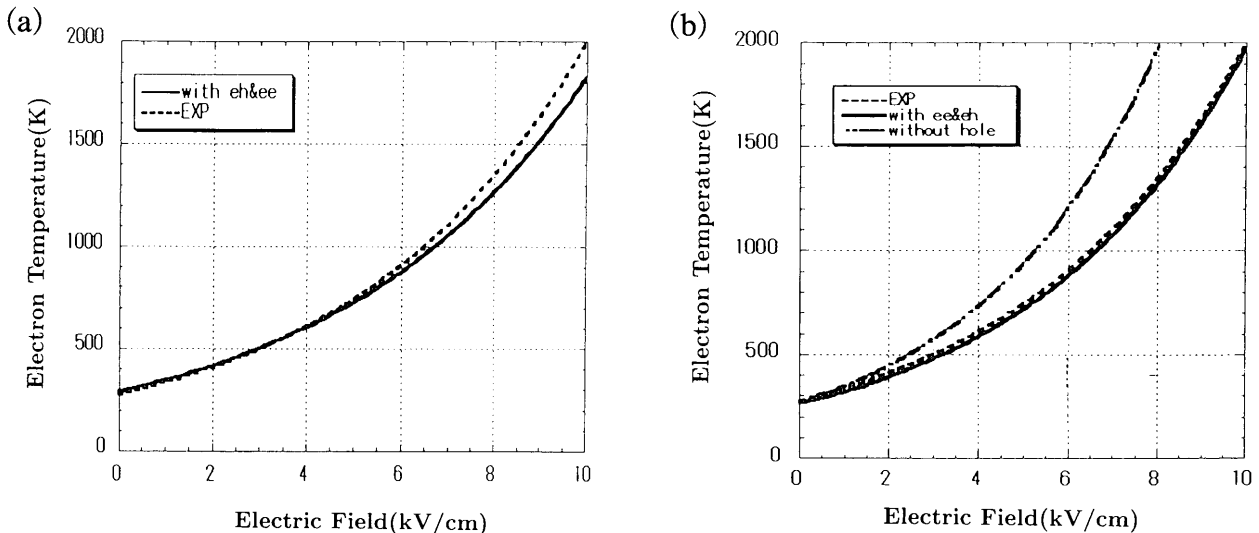


図 5. 電場に対する電子温度のシミュレーションと実測値との比較

(a) ホール温度一定 (300 K)

(b) 電場に応じたホール温度を導入した場合

これらの結果から電子のドリフト速度を考えると、キャリア間の相互作用が極めて重要であり、その散乱頻度計算にキャリアのエネルギー分布を精密に反映させることが必要であることが明らかになった。

3. 3. 電子温度

電子温度は超高速パルスレーザで半導体中に電子-ホール対を励起し、生成された電子のエネルギーの緩和過程により生じる発光を和周波混合法を用いて測定することで測定できる。図 5 (a) は種々の電場に対する電子温度をこの方法で測定した値とモンテ・カルロ法によるシミュレーション結果を比較したものである。このシミュレーションではホールの温度を電場にかかわらず一定と仮定している。図から電子温度は電場が大きくなるにつれて指数関数的に増加しているのが分かる。シミュレーション結果は 5 KV/cm 以下の低電場では実測データと良い一致を示している。しかしながら、これを超えると実測データより小さい値となり、その差は高電場になるほど大きくなり、10KV/cm では約 200 K、相対誤差で約 10% になっている。この差の最も大きな原因は、シミュレーションにおいてホールの温度を電場にかかわらず一定と仮定したことによるものと考えられる。すなわち、電場が高くなるとホールもこの電場に加速されて高いエネルギーを持つようになり、その結果ホールの分布が広がり、その温度が低電場に比べて大きくなる。ホール温度を一定とする近似ではこの効果が導入されていないので、実測とずれてくるものと考えられる。そこで、電場の大きさに応じてホールの温度を変化させ、電子-ホール散乱

の頻度を計算し、これに基づいたモンテ・カルロ計算により求めた電子温度を図 5 (b) に示した。図には比較のために実測データとホールとの相互作用を無視したシミュレーション結果を合わせて示した。ホールとの相互作用を無視したシミュレーションは実測データより大きな値を示しており、そのずれは高電場になればなるほど大きくなっている。これは p 型半導体中の電子はホールと大きな相互作用があり、ホールによる散乱を大きく受けることで電場による加速が大きく減速されエネルギーが上がり難くなっていることを示している。電場によるホール分布の変化を考慮したシミュレーション結果は停電場のみならず 10KV/cm までの広い電場の領域で実測データと非常に良い一致を示しており、ホールとの相互作用の重要性を示している。ホールの分布も電場により変化し、この効果を精密に考慮することが電子の輸送過程の解析に極めて重要であることが明らかになった。

4. ま と め

半導体中のキャリア輸送現象の解析においては、これまで主としてフォノン散乱と不純物散乱を中心として検討が進められてきた。しかしながら、高濃度不純物中や少数キャリアの輸送においてはキャリア間の散乱が非常に重要になってくる。本研究では p 型 GaAs 中での電子の輸送現象を精密に解析するために、従来のフォノンおよび不純物散乱を基礎とするモンテ・カルロ計算に電子-ホール相互作用の効果を導入する手法を検討し新たなシミュレーションプログラムを作成した。電子とホールの相互作用を考えると、ホールの分布が重要になる。こ

れまでの計算ではホールの有効質量が大きいことからホールの分布は電場によらず一定とする近似が主として用いられてきた。しかしながら、ホールの輸送に対するモンテ・カルロシミュレーションプログラムを新たに作成し、ホールのドリフト速度ならびに分布関数の電場依存性を検討した結果、ホールの分布関数に電場依存性があり、その効果を電子の輸送現象解析に導入することが必要であることを示した。この分布関数の電場依存性をそれぞれの電場におけるホールの drift-Maxwell 分布の中のホール温度として導入し、ホール分布に応じた電子-ホール散乱頻度と電子間散乱頻度を計算し、これをフォノンおよび不純物散乱に加えたモンテ・カルロシミュレーションにより 10kV/cm までの電場の範囲でドリフト速度ならびに電子温度ともに実測データと比較的良好一致が得られることを示した。この結果、電子輸送におけるキャリア間散乱の重要性を明らかにするとともに、キャリア間散乱の効果を精密に導入するためにそれぞれのキャリアの分布を変化に応じて取り入れていくことが必要であることを示した。

しかしながら、電子のドリフト速度の計算においては高電場ではまだシミュレーション結果と実測データとのずれが残されている。さらにより広い電場やキャリア濃度におけるシミュレーションデータの実測データとの一致を図るためには以下のような検討課題が残されている。

- ・ GaAs 中におけるホールの音響フォノンによる散乱の効果は低エネルギーでは光学フォノンに比べて約1桁小さいために、ホールの輸送現象解析において音響フォノン散乱の効果を見逃した。しかしながら、この音響フォノン散乱はエネルギーの 1/2 乗に比例して増加することから、エネルギーが高くなるとドリフト速度や電子温度に影響を及ぼすものと考えられる。
- ・ この解析では計算を簡単にするためにホールの輸送と電子の輸送を別々に計算し、電子とホールの相互作用はそれぞれの電場で独立に計算したキャリアの分布を電子-ホール間の散乱頻度の反映するという近似を導入している。本来は電子とホールは同時に存在しており、より精密にはこれらを同時に結合して解くことが必要である。このような電子とホールを一体とした解析を行うことで、より精度の高いシミュレーションが可能になる。
- ・ キャリア高濃度が高くなるとキャリアの縮退の効果が

重要になってくる。ここでの計算ではこのキャリアの縮退効果は無視し、その分布を drift-Maxwell と仮定し、さらにこの分布関数が 1 より十分小さいと仮定して、キャリア間の散乱の終状態は自由に取れるものとした。しかしながら、キャリア密度が高くなると分布はより精密には Fermi-Dirac 分布とし、散乱後の状態に対してもその状態がキャリアによって占有されていないことを確認して選択するという、いわゆるキャリアの縮退効果を考慮することも必要となってくる。

- ・ ここでは電子とホールの密度を同じと仮定して計算した。レーザ励起により電子-ホール対が生成されるために実際は電子の密度は多数キャリアのホールよりは小さいので電子間散乱がやや過大評価されている。より精密にはこの励起された電子密度を考慮することが必要である。

5. 謝 辞

本研究を推進するに当たり、実測データを提供して頂いた NTT 研究所の古田知史博士、また、有益な討論をして下さった富沢雅彰博士、谷山秀昭博士に深く感謝申し上げます。また、日頃ご指導いただきました日本女子大学の小館香椎子教授、上川井良太郎教授、さらに計算を進める上でお世話になりました坂牧貴子氏に感謝申し上げます。

参 考 文 献

- 1) W. Fawcett, A.D. Boardmann and S. Swain: J. Phys. Chem Solids, **31**, 1963 (1970)
- 2) A. Yoshii, M. Tomizawa and K. Yokoyama: IEEE Trans. Electron Devices **ED-30**, 1376 (1983)
- 3) P. Ligli and D.K. Ferry: IEEE Trans. Electron Devices **ED-32**, 2431 (1985)
- 4) M. Inoue and J. Frey: J. Appl. Phys., **51**, 4234 (1980)
- 5) H. Taniyama, M. Tomizawa, T. Furuta and A. Yoshii: J. Appl. Phys., **58**, 621 (1990)
- 6) T. Furuta, H. Taniyam and M. Tomzawa: J. Appl. Phys., **67**, 293 (1990)
- 7) T. Furuta: *Semiconductors and Semimetals* vol. 39, (Academic Press, 1993), ch.3
- 8) B.K. Ridley: *Quantum Process in Semiconductors* (Oxford University Press, New York, 1990)
- 9) I. Chen and F. Junsen: J. Appl. Phys., **67**, 7389 (1990)
- 10) M.A. Osman and D.K. Ferry: Phys. Rev. **B36**, 6018 (1987)

Carrier-carrier Interaction Effects on Electron Transport in GaAs

Ayako Masamune, Emiko Hoshino and Akira Yoshii
The Graduate School of Science, Division of Mathematical and
Material Structure Science, Japan Women's University

(Received December 16, 2002)

Abstract: Electron transport in p-GaAs is studied in detail using an ensemble Monte Carlo calculation. Carrier-carrier interactions, such as electron-electron, hole-hole and electron-hole, are taken into account. Not only electrons but also holes are analyzed to obtain their exact distribution functions. For drift velocity and temperature of minority-electrons in p-GaAs, the calculated results shows good agreement with experimental data by accurately including field dependent carrier-carrier interactions. Throughout the study, it is demonstrated that the interaction with holes is essential for electron transport in p-GaAs.