

講義資料

<http://conf.msl.titech.ac.jp/Lecture/>

統計力学・半導体

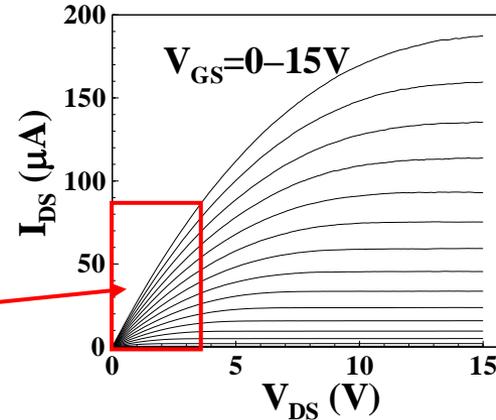
課題

1. 厚さ 100 nm の a-SiO₂ の単位面積当たり静電容量 C_{OX} を求めよ。
a-SiO₂ の比誘電率は $\epsilon_r = 11.9$ とする。
2. TransferCurve.xlsx のデータから、飽和移動度を求めよ
電極幅 $W = 300 \mu\text{m}$, $L = 50 \mu\text{m}$ とする。
飽和移動度を求める際の V_g , V_d は各自で選ぶこと。
その値を選んだ理由も説明せよ。

PowerPoint 等のプレゼンテーションファイルにして提出
期限: 今日の17:00までに
できたところまでで可

FET特性の解析: 線形領域

$$I_{DS} = \frac{W}{L} \mu C_{OX} \left[(V_{GS} - V_{th}) V_{DS} - \frac{V_{DS}^2}{2} \right]$$



$V_{DS} \ll V_p(V_{GS})$ (e.g., $\ll 0.1$ V)

$$I_{DS} = \frac{W}{L} \mu C_{OX} V_{DS} (V_{GS} - V_{th})$$

I_{DS} は V_{DS} に比例:
 I_{DS} vs. V_{GS} をプロット
 V_{GS} 軸切片: V_{th}
傾き: 線形領域移動度

有効移動度 (effective mobility): μ_{eff}

電界効果移動度 (field-effect mobility): μ_{FE}

$$\mu_{eff} = g_{DS} \frac{L}{WC_{OX}(V_{GS} - V_{th})}$$

$$\mu_{FE} = g_m \frac{L}{WC_{OX}V_{DS}}$$

$$g_{DS} = \frac{dI_{DS}}{dV_{DS}}$$

Drain conductance

$$g_m = \frac{dI_{DS}}{dV_{GS}}$$

Transconductance

FET特性の解析: 飽和領域

$$I_{DS} = \frac{W}{L} \mu C_{OX} \left[(V_{GS} - V_{th}) V_{DS} - \frac{V_{DS}^2}{2} \right]$$

$$V_{DS} > V_p = V_{GS} - V_{th}$$

$$I_{DS} = \frac{W}{2L} \mu C_{OX} (V_{GS} - V_{th})^2$$

$$I_{DS}^{1/2} = \sqrt{\frac{W}{2L} \mu C_{OX} (V_{GS} - V_{th})^2}$$

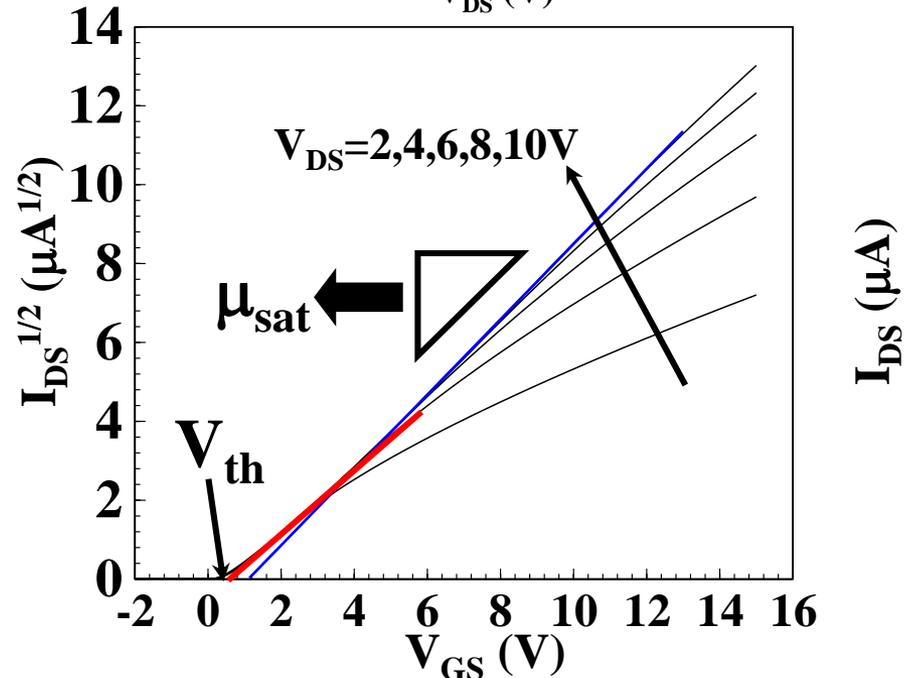
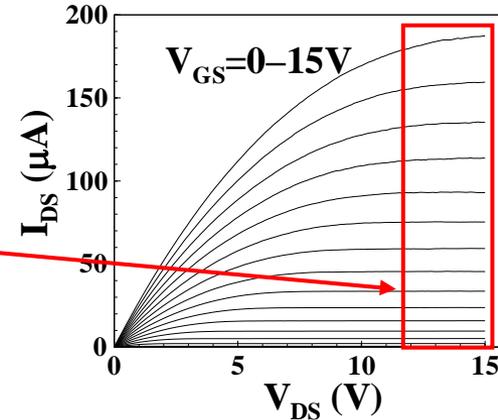
$I_{DS}^{1/2}$ vs. V_{GS} をプロット

V_{GS} 軸切片: V_{th}

傾き: 飽和移動度

Saturation mobility, μ_{sat}

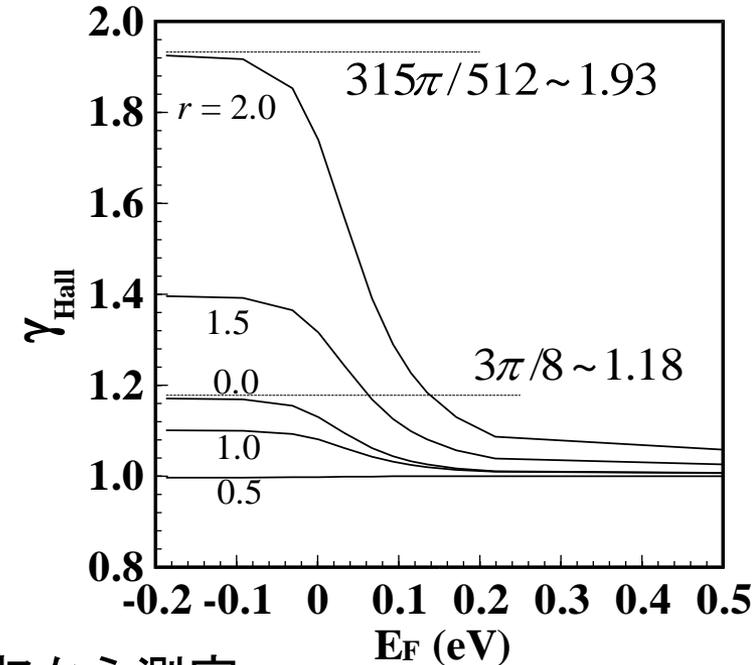
a-IGZO TFT



Non-equilibrium statistics dynamics

非平衡統計力学

いろいろな移動度



- **ドリフト移動度** (定義): $\mu_d = E / v_{drift}$
- **伝導度移動度**: $\mu = \sigma / (en)$ どうやって n を測定?
- **Hall移動度**: Hall効果からHall係数 R_H を測定
 $V_H = R_H I_x B_Z / d$, $R_H = 1 / en_{Hall} = \gamma / en$
 $\mu_{Hall} = \sigma / (en_{Hall}) = \gamma \mu_d$
($\gamma = 1 - 2$: Hall因子, 散乱因子)

- **光学移動度**: 赤外・マイクロ波領域の自由電子吸収から測定
- **MOSFET移動度**
有効移動度、電界効果移動度、飽和移動度

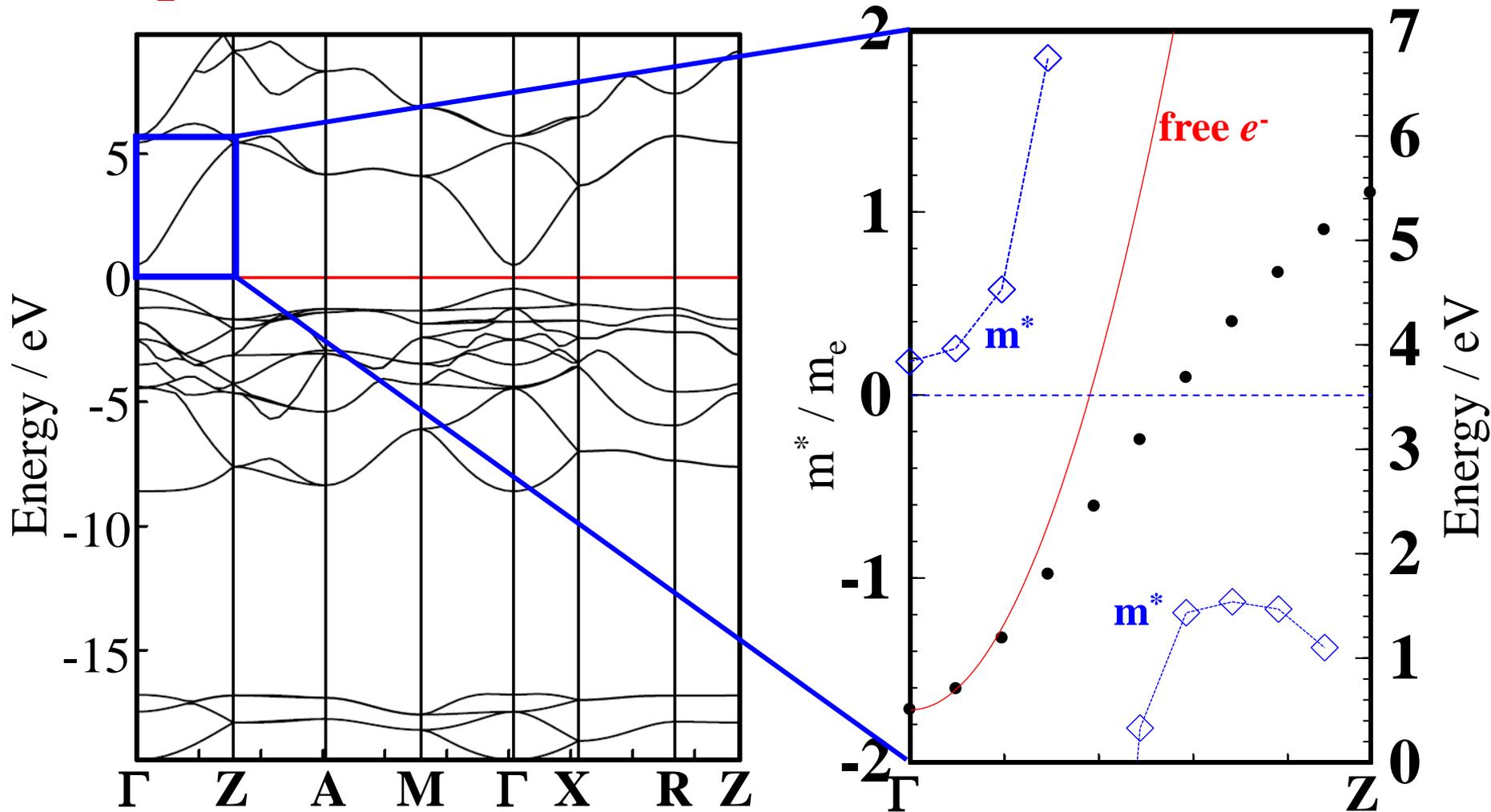
- **Time-of-flight (TOF) 移動度**
パルス電圧・レーザー励起などで薄いシートキャリアを生成し、対向電極に到達する時間から移動度を測定する
 $v = \mu E = \mu V / L$, $\Delta t = L / v$: $\mu_{TOF} = L^2 / (V \Delta t)$

- **磁気抵抗効果移動度**

有効質量に与える影響: Band effective mass

SnO₂

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n(\mathbf{k})}{\partial k^2}$$



いろいろな有効質量

バンド有効質量: 電子が動いてもバンド構造に影響しない

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n(\mathbf{k})}{\partial k^2}$$

キャリア有効質量: 電子が動くと格子イオンと相互作用

$$\mu = \frac{e\tau}{m_e^*} \quad \frac{m_e^*}{m^*} = 1 + \frac{\alpha}{6} + 0.0236\alpha^2$$

α : Fröhlich coupling constant

GaAs: 0.068 SrTiO₃ 3.77

状態密度有効質量: m_e^* の異方性、多重度を考慮

$$D(E) = M_C \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{\sqrt{E - E_C}}{\hbar^3} m_e^{3/2} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{\sqrt{E - E_C}}{\hbar^3} m_{de}^{3/2}$$

有効質量からわかる量

移動度、伝導度 $\mu = \frac{e\tau}{m_e^*}$ $\sigma = eN_{free}\mu$

状態密度 M_C は等価なLUMOの k 点の数。

$$N(E) = M_C \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{\sqrt{E - E_C}}{\hbar^3} m_e^{3/2} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{\sqrt{E - E_C}}{\hbar^3} m_{de}^{3/2}$$

バースタイン・モスシフト
(縮退半導体の E_F)

$$\Delta E_g^{BM} = \frac{h^2}{m_{de}} \left(\frac{3N_e}{16\sqrt{2}\pi} \right)^{2/3}$$

有効状態密度 スピン以外の縮退のない等方的なsバンドでは、状態密度有効質量 m_{de} はキャリア有効質量 m_e^* に等しい

$$N_C = 2 \left(\frac{2\pi m_{de} k_B T}{h^2} \right)^{3/2}$$

熱速度 $\frac{1}{2} m_e^* v_{th}^2 = \frac{3}{2} k_B T$ $v_{th} = \sqrt{3k_B T / m_e^*}$

フェルミ速度 $\frac{1}{2} m_e^* v_F^2 = E_F - E_C$ $v_F = \sqrt{2(E_F - E_C) / m_e^*}$

Termoelectrics

熱起電力

Thermoelectricity: Boltzmann equation

太田英二、坂田亮著、半導体の電子物性光学、培風館 (2005)

Boltzmann-Bloch equation

$$\frac{df(\mathbf{k})}{dt} = -\frac{F}{\hbar} \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} - \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{r}} - \frac{f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k})}{\tau(\mathbf{k})}$$

$$\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \frac{d\varepsilon(\mathbf{k})}{dk}: \text{group velocity} \Leftrightarrow \mathbf{v}_{\mathbf{p}} = \frac{\varepsilon(\mathbf{k})}{k}: \text{phase velocity}$$

$$\text{Steady-state} \quad \frac{df(\mathbf{k})}{dt} = -\frac{F}{\hbar} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} - \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{r}} - \frac{f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k})}{\tau(\mathbf{k})} = 0$$

Non-uniform T and chemical potential η : depend on position \mathbf{r}

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k}) &= -\tau(\mathbf{k}) \left(\frac{F}{\hbar} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{r}} \right) \\ &= -\tau(\mathbf{k}) \left(e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot T \nabla \frac{\varepsilon - \eta}{T} \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) \\ &= -\tau(\mathbf{k}) \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \left(e\mathbf{E} + T \nabla \frac{\varepsilon - \eta}{T} \right) \end{aligned}$$

Thermoelectricity: Boltzmann equation

太田英二、坂田亮著、半導体の電子物性光学、培風館 (2005)

$$\mathbf{J} = en \frac{\int (\mathbf{v}_k \otimes \mathbf{v}_k) \tau(\mathbf{k}) \left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) \left[e\mathbf{E} + T \nabla \frac{\varepsilon - \eta}{T} \right] d\mathbf{k}}{\int f_0(\mathbf{k}) d\mathbf{k}}$$

$(\mathbf{v}_k \otimes \mathbf{v}_k) = (v_{k,i} v_{k,j})$: Direct product of vectors

$$\nabla \frac{\varepsilon - \eta}{T} = -\frac{\varepsilon - \eta}{T} \nabla T - \nabla \eta$$

Chemical potential η is a function of carrier density $n(r)$

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \sigma \cdot \mathbf{E} + en \frac{\langle \tau \rangle}{m_e^*} \left[\frac{1}{T} \left(\frac{\langle \tau \varepsilon \rangle}{\langle \tau \rangle} - \eta + T \frac{\partial \eta}{\partial T} \right) \nabla T + \frac{\partial \eta}{\partial n} \nabla n \right] \\ &= \sigma \cdot \mathbf{E} + \sigma \left[S \nabla T + \frac{1}{e} \frac{\partial \eta}{\partial n} \nabla n \right] \end{aligned}$$

$$\mathbf{S} = \frac{1}{eT} \left[\left(\frac{\langle \tau \varepsilon \rangle}{\langle \tau \rangle} - \eta + T \frac{\partial \eta}{\partial n} \right) \right]$$

熱起電力(Seebeck係数)

$$S = \frac{1}{eT} \left[\frac{\langle \tau \varepsilon \rangle}{\langle \tau \rangle} - \eta + T \frac{\partial \eta}{\partial n} \right]$$

$$S = -\frac{k}{e} \frac{\int \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) D(E) v^2 \tau \left[\frac{E-E_F}{kT}\right] dE}{\int \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) D(E) v^2 \tau dE} + \frac{1}{e} \frac{\partial E_F}{\partial T} \quad \text{Seebeck係数}$$

$$\tau = (m_e^*/2)^{1/2} l_0(T) E^{r-1/2}$$

縮退半導体: バンドが自由電子的な単一バンドで、 $\tau = \tau_0 + ((E-E_F)/E_F) \tau_1$ の場合

$$S \sim -\frac{k}{e} \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{3}{2} + \frac{\tau_1}{\tau_0} \right) \frac{kT}{E_F}$$

$$\tau = (m_e^*/2)^{1/2} l_0(T) E^{r-1/2}$$

非縮退半導体:

$$S \sim -\frac{k}{e} \left(\frac{E_C - E_F}{kT} + r + 2 \right) = \boxed{-} \frac{k}{e} \left(\ln \frac{N_C}{N_e} + r + 2 \right)$$

電子

$$S \sim +\frac{k}{e} \left(\frac{E_F - E_V}{kT} + r + 2 \right) = \boxed{+} \frac{k}{e} \left(\ln \frac{N_V}{N_h} + r + 2 \right)$$

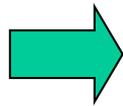
正孔

ホッピング伝導 (small polaron): エントロピー輸送

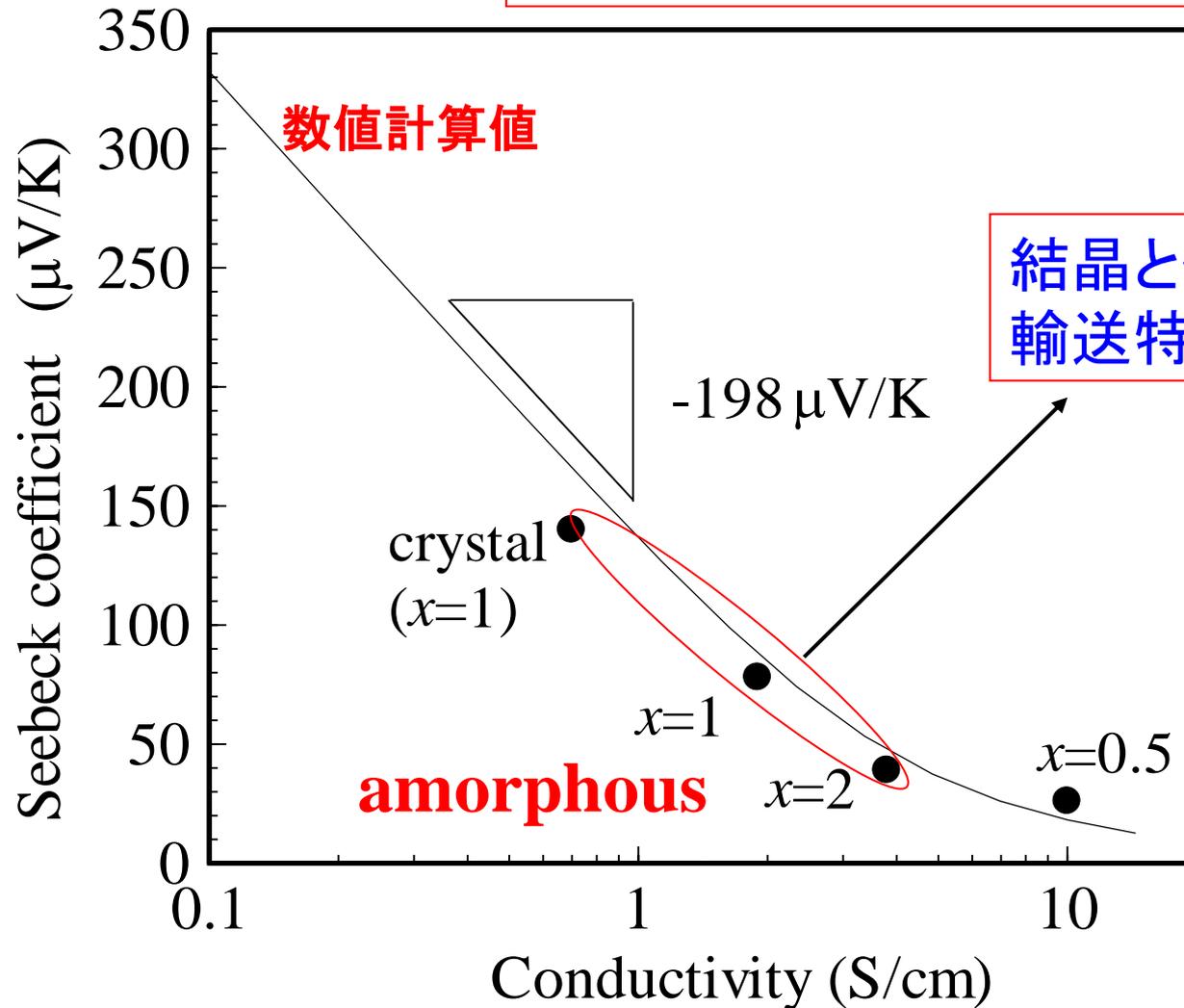
$$S = \frac{k}{e} \ln \left(\frac{n}{N-n} \right)$$

Jonker plot: ex. For p-type $x\text{ZnO}\cdot\text{Rh}_2\text{O}_3$

$$n = \sigma / \mu / e$$



$$S = -\frac{k}{e} (\log \sigma - \log \mu_h + A) \frac{k}{e} = 198 \mu\text{V/K}$$



局在電子のSeebeck係数符号反転

局在状態でのVRH伝導の場合

(拡散係数をエネルギーに対して一定とする)。

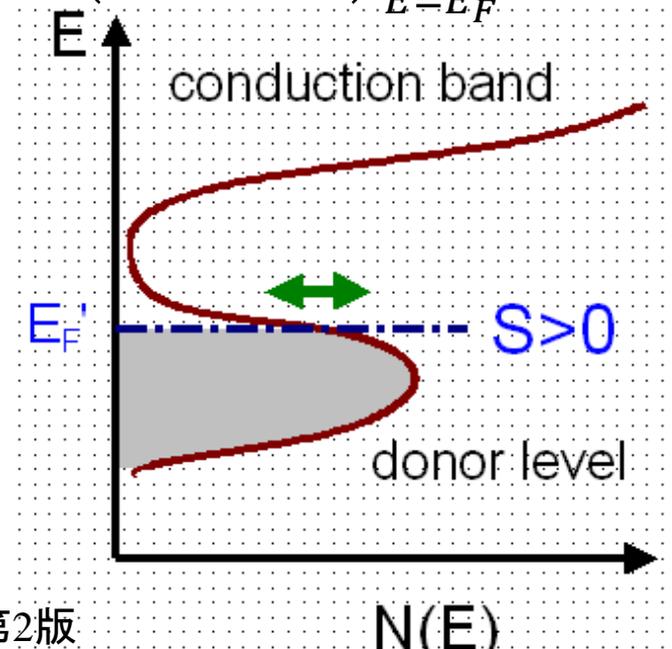
$$\text{Mottの式: } S = \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3 e} \left(\frac{d \ln \sigma(E)}{dE} \right)_{E=E_F}$$

$$\sigma(E) = e^2 D(E) D$$

$$S = \frac{1}{2} \frac{k_B}{e} \frac{W^2}{k_B T} \left(\frac{d \ln D(E)}{dE} \right)_{E=E_F} = \frac{1}{2} \frac{k_B^2}{e} (T_0 T)^{1/2} \left(\frac{d \ln N(E)}{dE} \right)_{E=E_F}$$

$$W = k_B (T_0 T^3)^{1/4}$$

ホッピングの活性化エネルギー
に等しいと仮定する



G.H. Jonker, Philips Res. Repts 23 (1968) 131

I.P. Zvyagin, Phys. Stat. Sol. B58 (1973) 443

V.V. Kosarev, Sov. Phys. – Semicond. 8 (1975) 897

H. Overhof, Phys. Stat. Sol. B67 (1975) 709

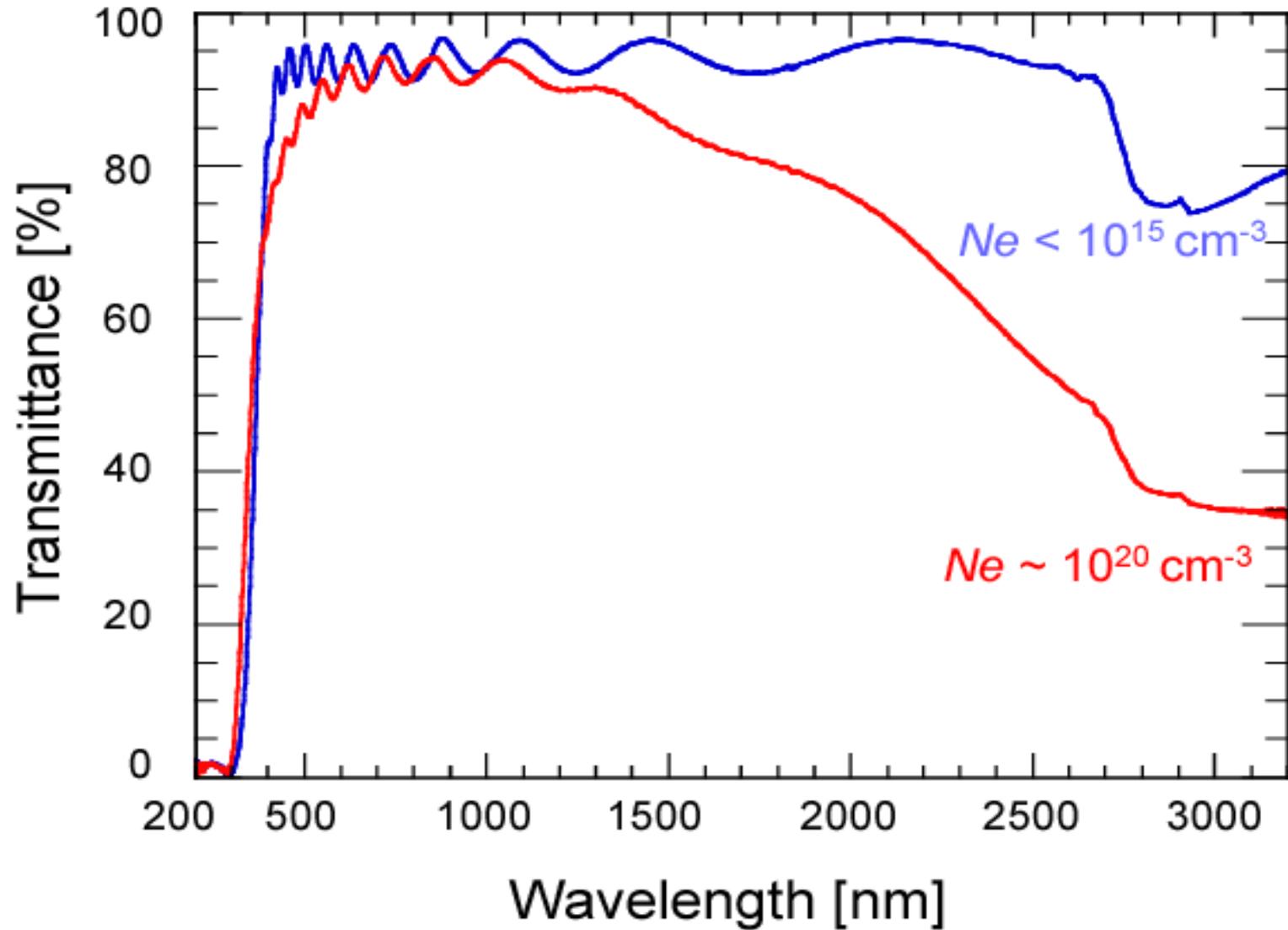
P. Butcher, in Proc. 6th ICALS (1976) p.89

「非晶質材料の電気伝導」、ネビルモット著、現代工学社、2003年第2版

Optical mobility

光学移動度

Free carrier absorption



自由電子吸収と光学伝導度

キャリア濃度 n の物質で自由電子による光吸収

$$m^* \frac{d^2 x}{dt^2} + \frac{m^*}{\tau} \frac{dx}{dt} = qE$$

$$D = \varepsilon_0 E + P = \varepsilon_0 E + qNx = \varepsilon E$$

$$E = E_0 \exp(i\omega t)$$

$$\mu = \frac{m^* q}{\tau}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_1 = n_f^2 - k_f^2 = \varepsilon \left(1 - \frac{\omega_p^2 \tau^2}{1 + \omega^2 \tau^2} \right) \\ \varepsilon_2 = 2n_f k_f = \varepsilon \frac{\omega_p^2 \tau}{\omega(1 + \omega^2 \tau^2)} \end{array} \right.$$

プラズマ周波数

$$\omega_p^2 = \frac{nq^2}{\varepsilon m^*}$$

光学伝導度

$$\sigma(\omega) = \omega \varepsilon_2(\omega) = \varepsilon \frac{\omega_p^2 \tau}{1 + \omega^2 \tau^2}$$

物質	$\sigma(10^5 \text{S/cm})$	$n(10^{22} \text{cm}^{-3})$	$\mu(\text{cm}^2/\text{Vs})$	$\lambda_p(\text{nm})$
Li	1.07	3.67	18.2	174
Ag	6.21	6.9	56	130
ITO	~0.1	~0.1	~100	~1000

ITOの場合、 n が $2 \times 10^{21} \text{cm}^{-3}$ を超えると急激に800nmの反射率が大きくなる

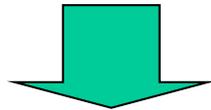
自由電子吸収から何が分かるか

$$\varepsilon_1 = \varepsilon \left(1 - \frac{\omega_p^2 \tau^2}{1 + \omega^2 \tau^2} \right) \quad \varepsilon_2 = \varepsilon \frac{\omega_p^2 \tau}{\omega(1 + \omega^2 \tau^2)}$$

プラズマ周波数 $\omega_p^2 = \frac{ne^2}{\varepsilon m^*}$

光学伝導度 $\sigma(0) = \varepsilon \omega_p^2 \tau$
($= en\mu$)

実験で分かる量: ω_p, τ
未知数: m^*, n, τ



Hall効果などから、 $n_{FCA} \sim n_{Hall}$ とする

$\Rightarrow m^*, \tau$ を決める \Rightarrow 光学移動度 $\mu_{FCA} = \frac{e\tau}{m^*}$

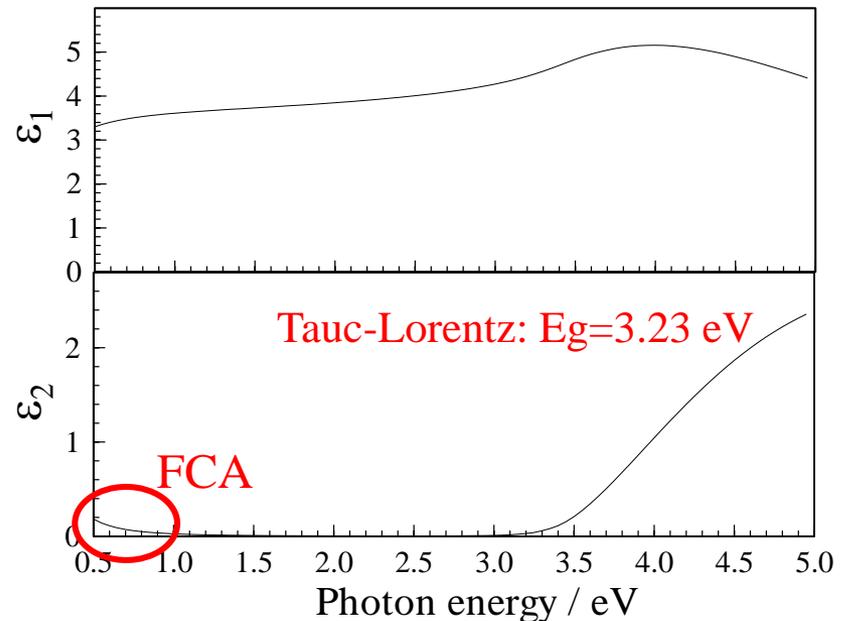
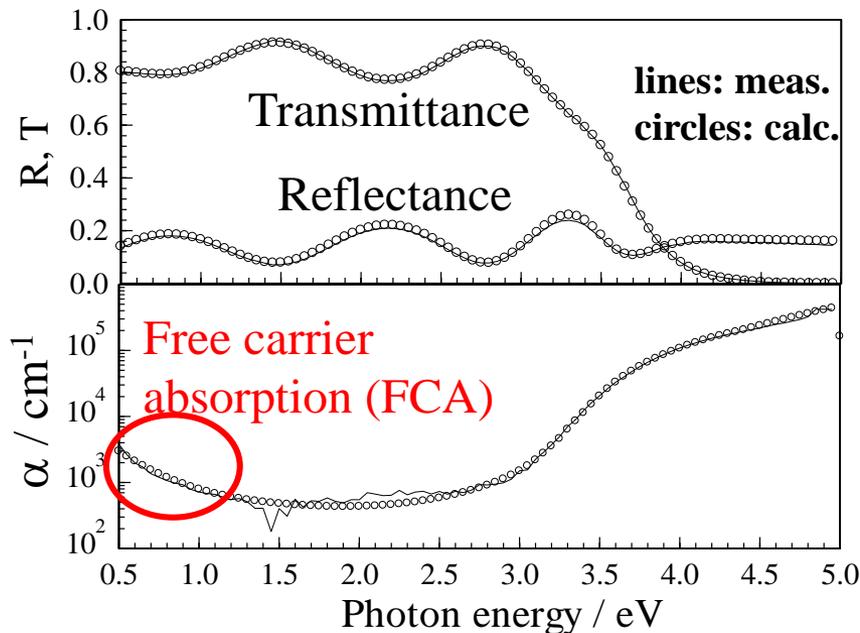
単結晶の m^* を使う

$\Rightarrow n_{FCA}, \tau$ を決める \Rightarrow 光学移動度 n_{Hall} との違いを議論できる

FCA解析: a-IGZO

annealed HQ

T&R spectra combined + Film / Substrate layers optical model
Tauc-Lorentz model + Lorentz model (at $\sim E_G$) + Drude model
Accuracy $\sim 2\%$ $\Rightarrow \alpha = -\ln(0.98)/d \sim 900 \text{ cm}^{-1}$ (for $d = 230 \text{ nm}$)



Band edge reproduced by a Tauc-Lorentz model

FCA fit well to a Drude model with a single τ :

Free electron-like transport

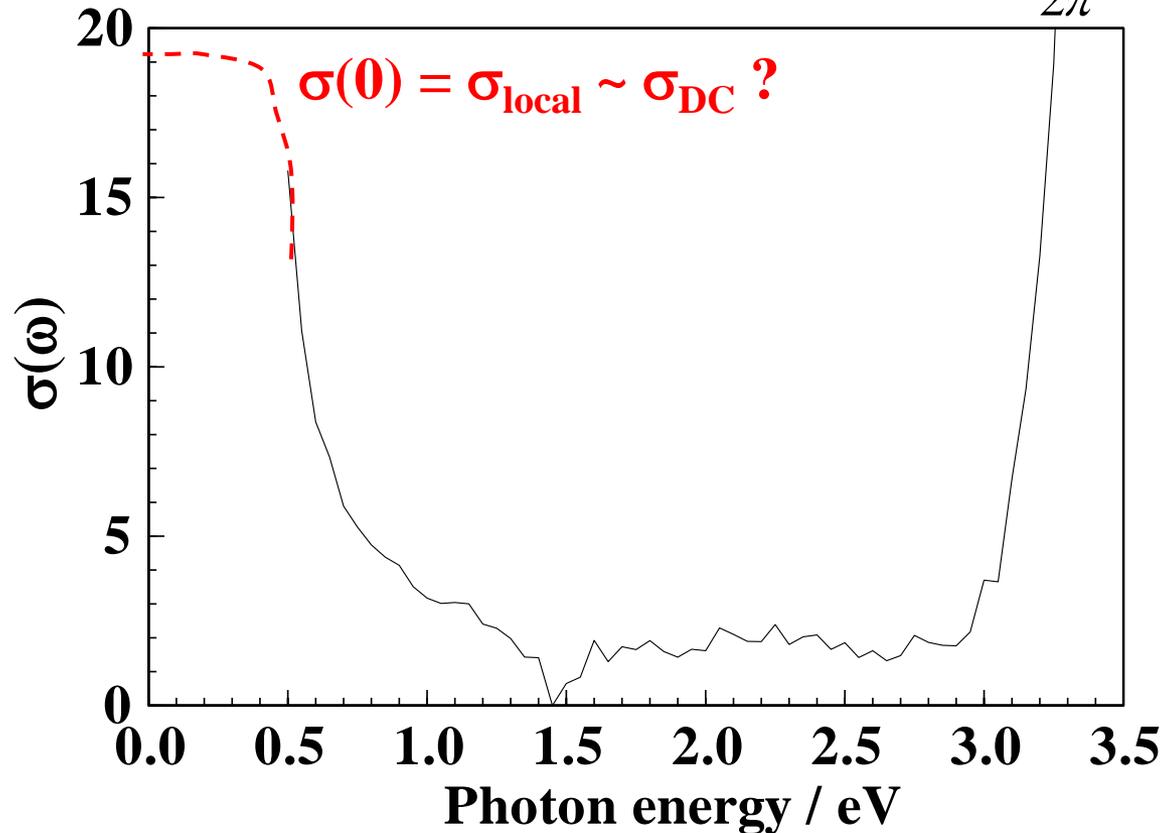
光学伝導度

annealed HQ a-IGZO

光学伝導度

$$\sigma(\omega) = \omega \varepsilon_2(\omega) = \varepsilon \frac{\omega_p^2 \tau}{1 + \omega^2 \tau^2}$$

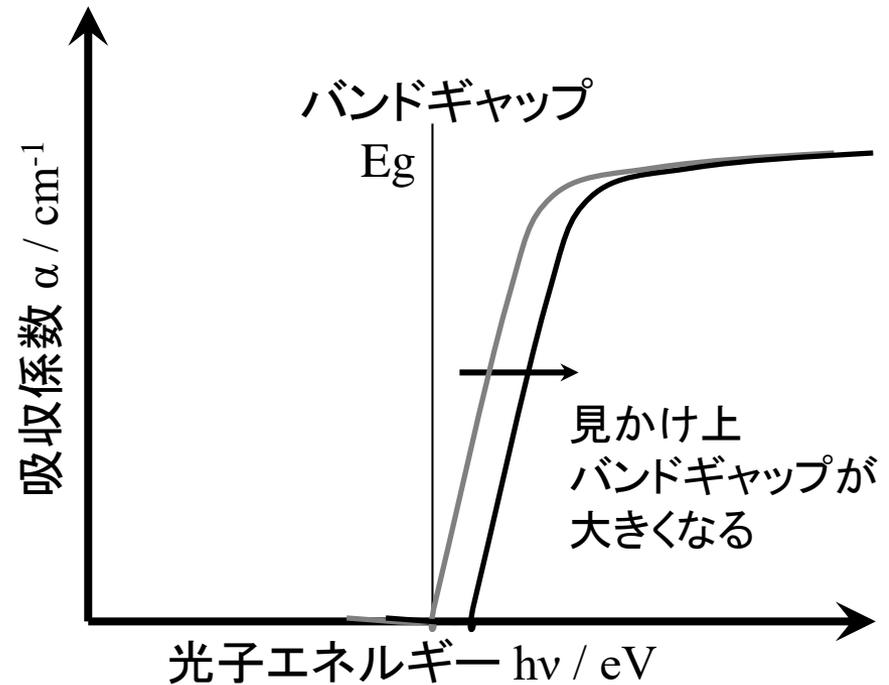
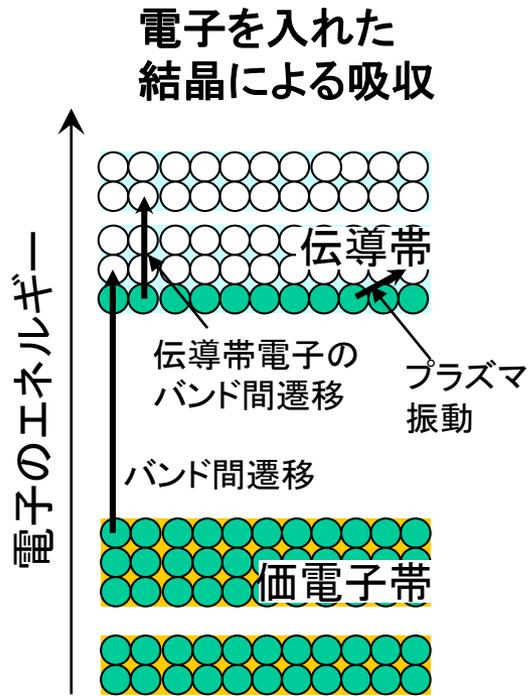
$$\varepsilon_2(\omega) / \varepsilon_0 = \frac{\lambda n}{2\pi} \alpha(\omega) = \frac{cn}{\omega} \alpha(\omega)$$



粉末試料でも導体かどうかを判断できる

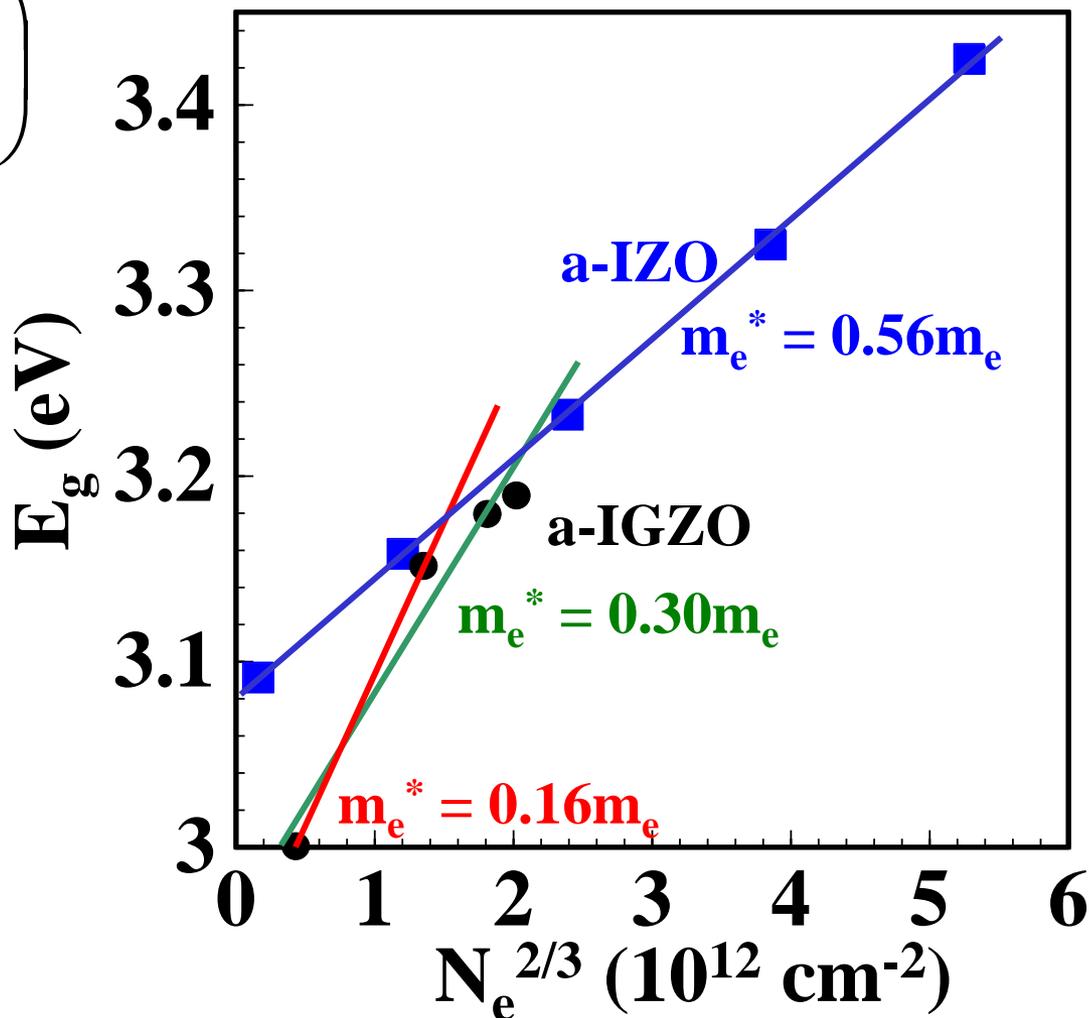
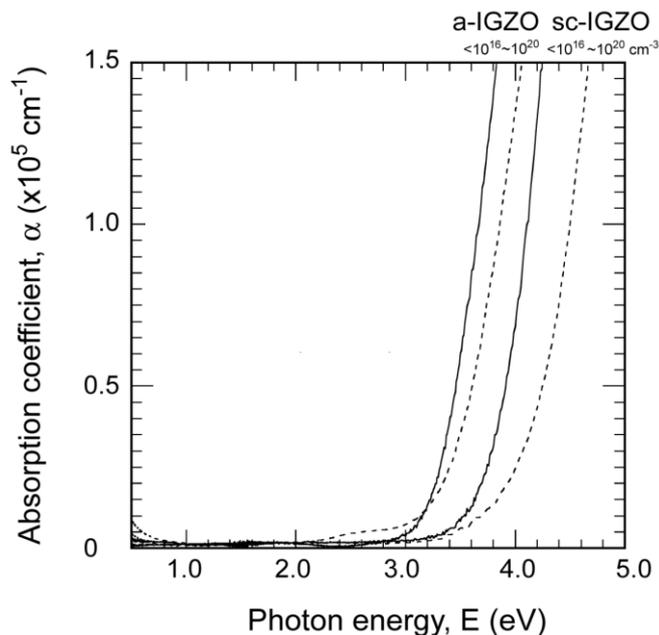
高ドーピング半導体の光吸収

バンドフィリング効果 (Burstein-Moss shift)



バンドフィリング効果(BMシフト)

$$\Delta E_g^{BM} = \frac{h^2}{m_{de}} \left(\frac{3N_e}{16\sqrt{2}\pi} \right)^{2/3}$$



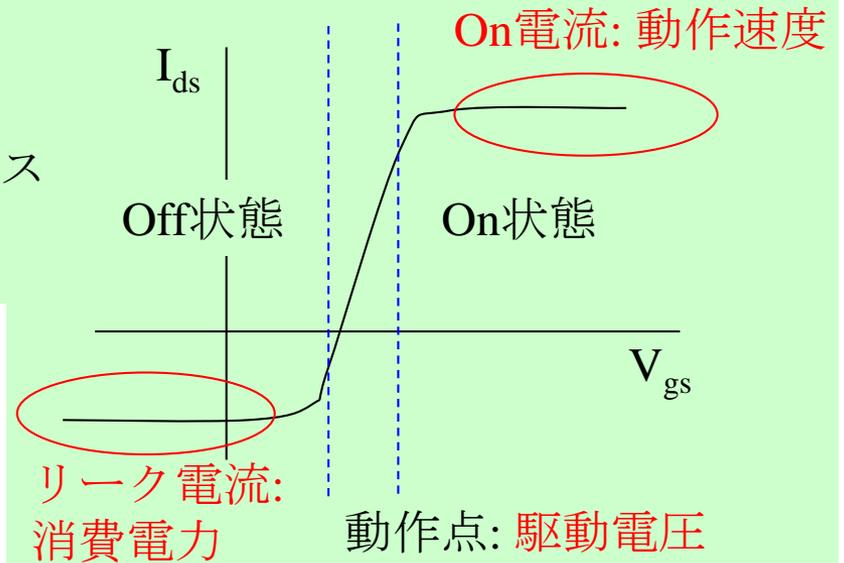
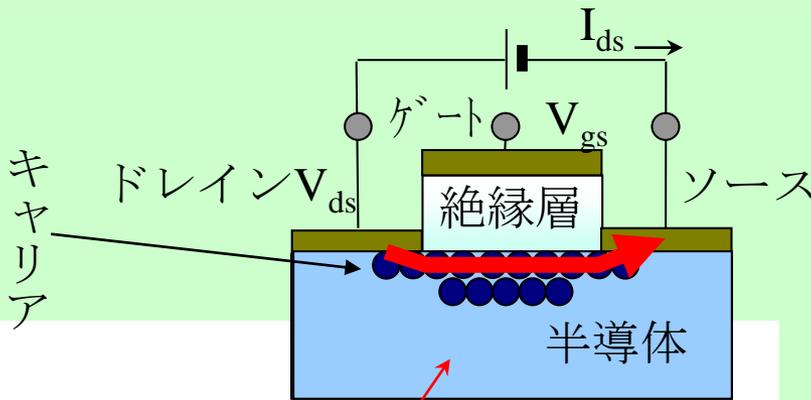
Field-effect mobility

電界効果移動度

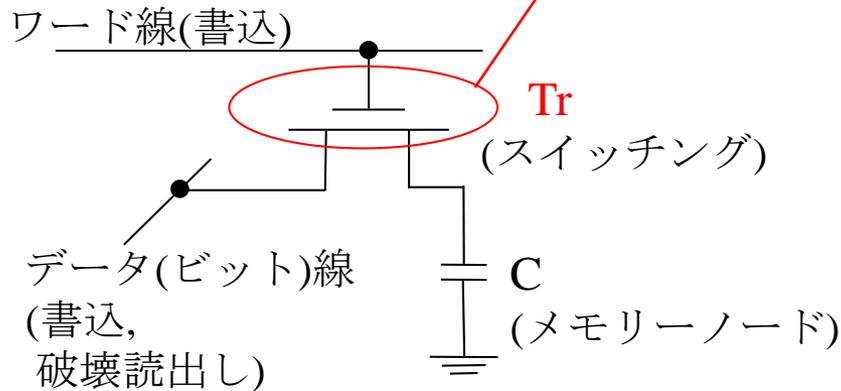
電界効果トランジスタ(FET)の基本動作

トランジスタの基本機能

1. 増幅機能 ゲート電圧に電流が比例する領域を利用
2. **スイッチ機能** ゲート電圧による大きな電流の変調を利用

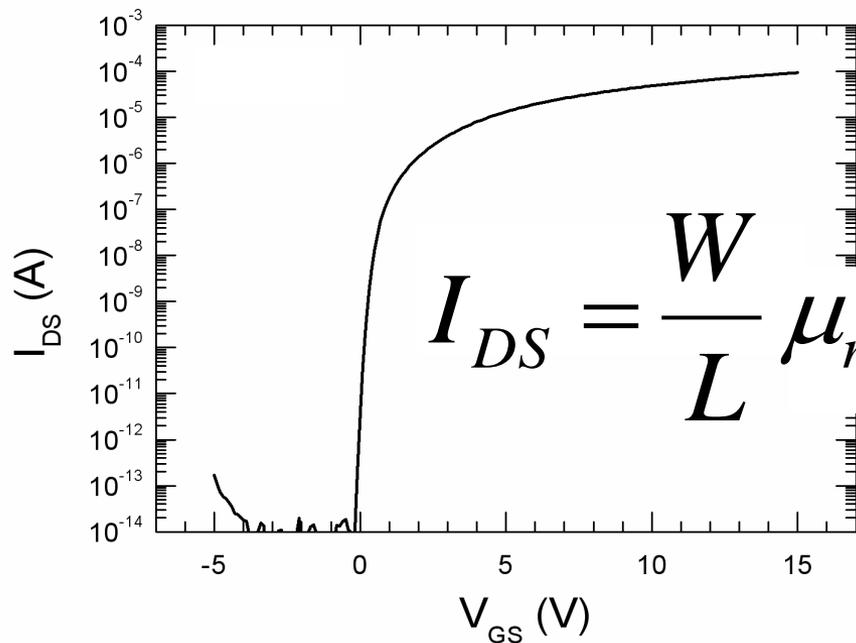
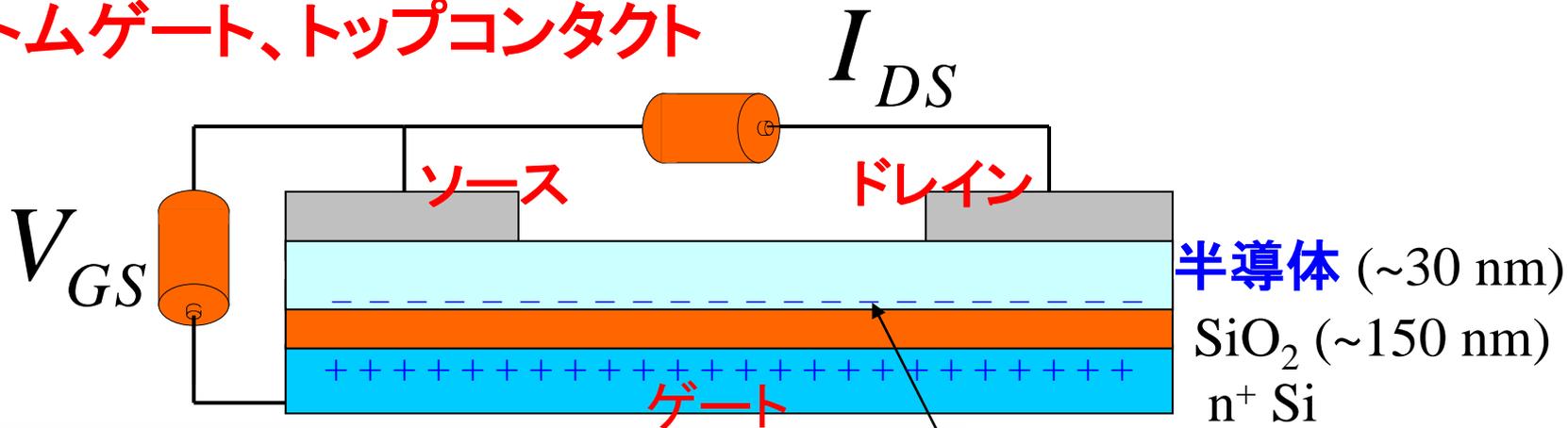


1Tr1C DRAM



TFTの構造と動作原理

ボトムゲート、トップコンタクト



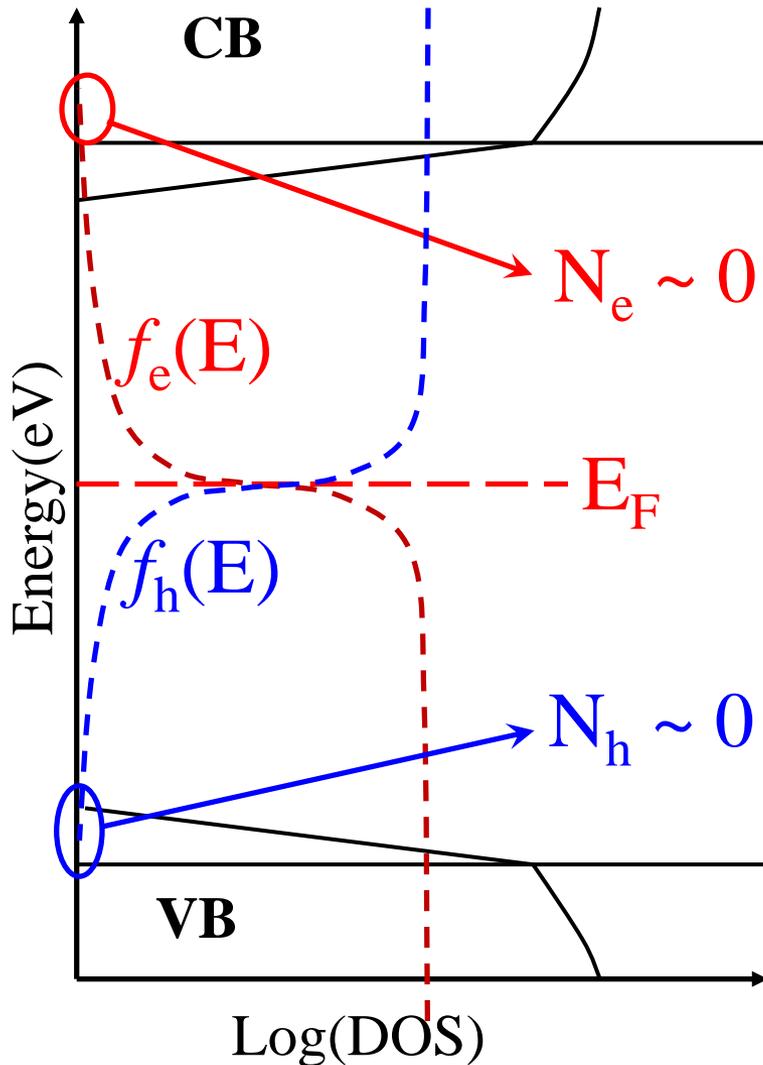
$$Q_{ind} \approx C_g (V_{GS} - V_{th})$$

$$I_{DS} = \frac{W}{L} \mu_{mobile} C_g (V_{GS} - V_{th}) V_{DS}$$

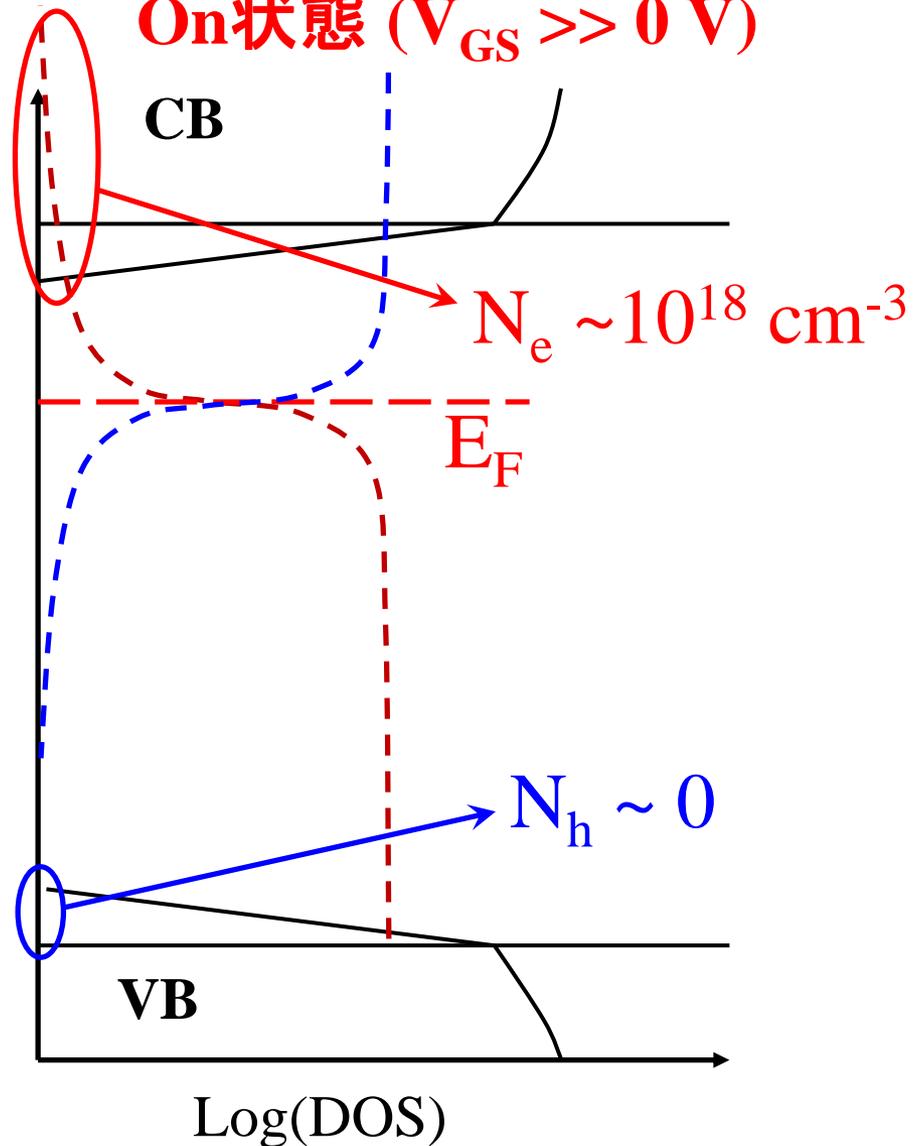
理想的な場合

TFTのNチャネル動作

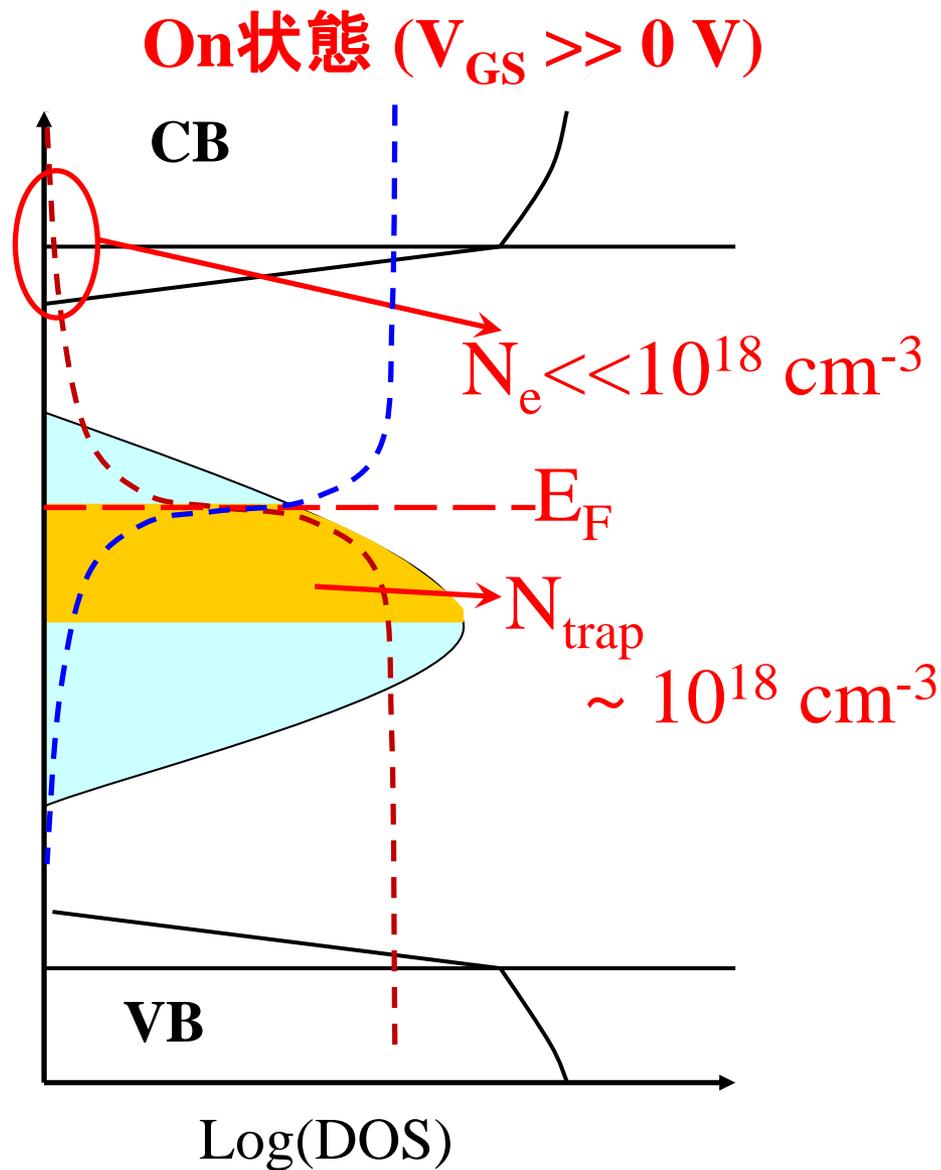
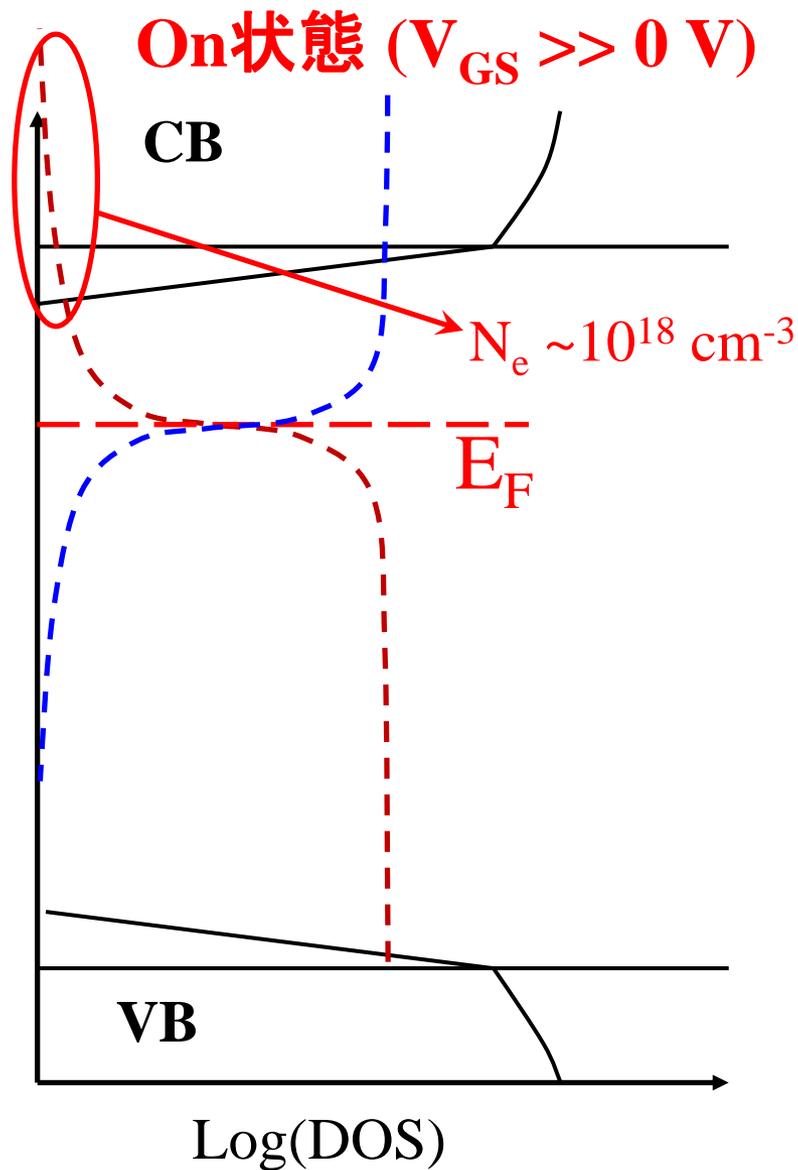
Off状態 ($V_{GS} \sim 0$ V)



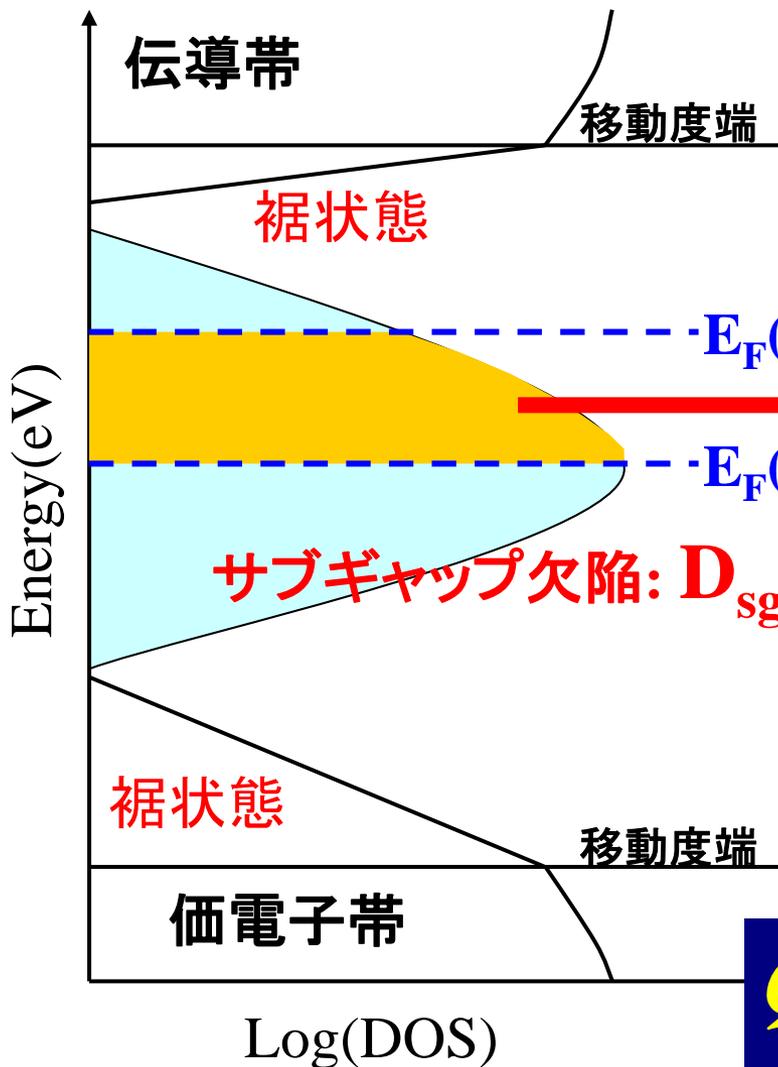
On状態 ($V_{GS} \gg 0$ V)



ギャップ内トラップによるフェルミ準位ピンニング



バンドギャップ内欠陥とTFT特性



$$I_{DS} = \frac{W}{L} \mu_{drift} C_{OX} \left[(V_{GS} - V_{th}) V_{DS} - \frac{V_{DS}^2}{2} \right]$$

$$Q_{ind} \approx C_g V_{GS}$$

$$Q_{sg} = \int_{E_F(0)}^{E_F(V_{GS})} D_{sg}(E) dE$$

$$I_{DS} = \frac{W}{L} \mu_{FE} C_{OX} \left[(V_{GS} - V_{th}) V_{DS} - \frac{V_{DS}^2}{2} \right]$$

$$\mu_{FE} = \mu_{drift} \frac{Q_{ind} - Q_{sg}}{Q_{ind}}$$

$$Q_{ind} \sim 10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ (100ppm)}$$

$Q_{sg} \ll Q_{ind}$ が必要

高性能TFTを作るための条件

$$I_{DS} = \frac{W}{L} \mu_{drift} C_g \left[(V_{GS} - V_{th}) V_{DS} - \frac{V_{DS}^2}{2} \right]$$

大 I_{DS} を実現するには

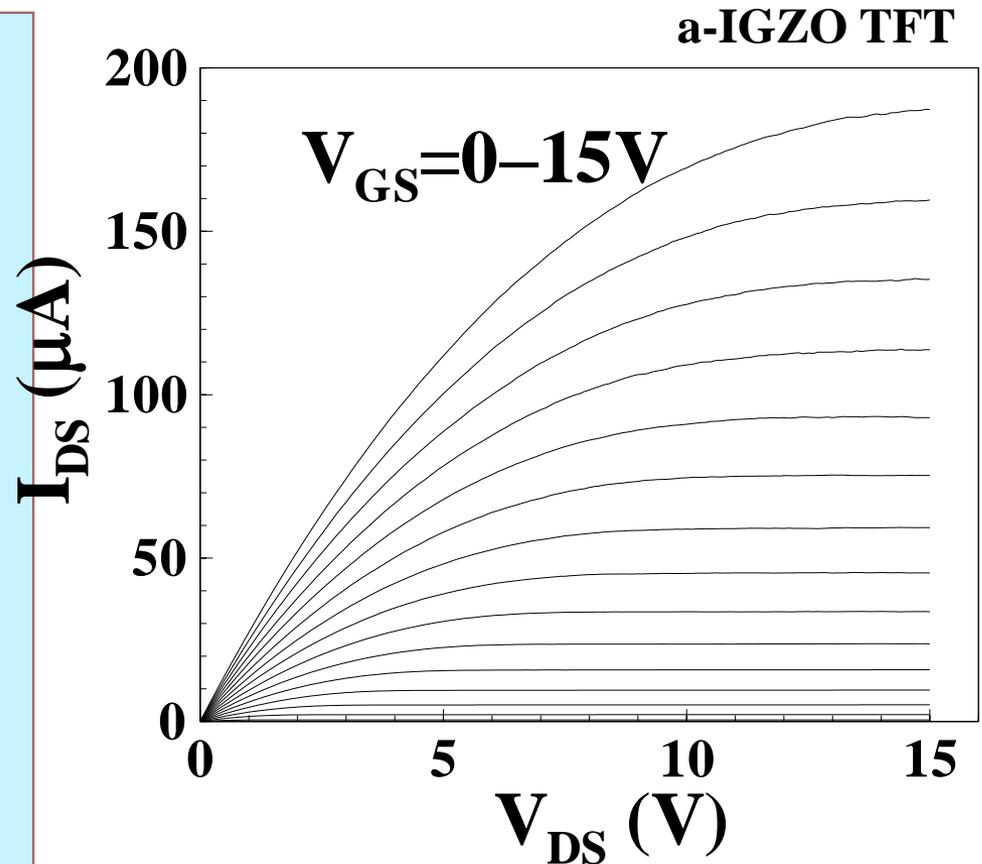
- 大きい W/L 比
- 大きい C_g
- 高い V

- 大きい μ_{drift}
(ドリフト移動度)

$$\sigma = en\mu_{drift}$$

- 少ないトラップ密度

$$\mu_{FE} = \mu_{drift} \frac{Q_{ind} - Q_{sg}}{Q_{ind}}$$



電界効果移動度とドリフト移動度の関係

Hall効果 ($N_{e,Hall}$)、TFT特性 (μ_{sat})

Hsieh et al., APL 92,133503 (2008)

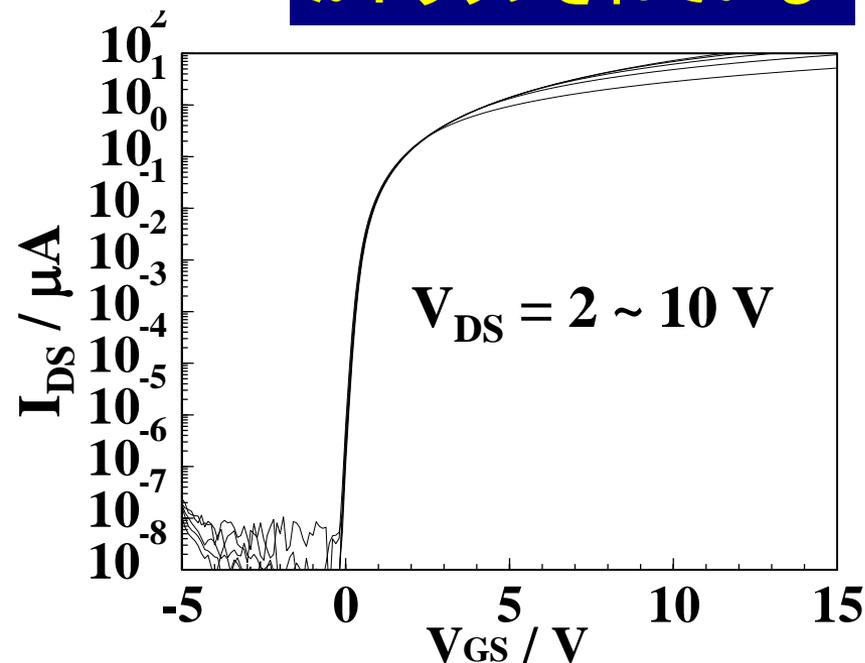
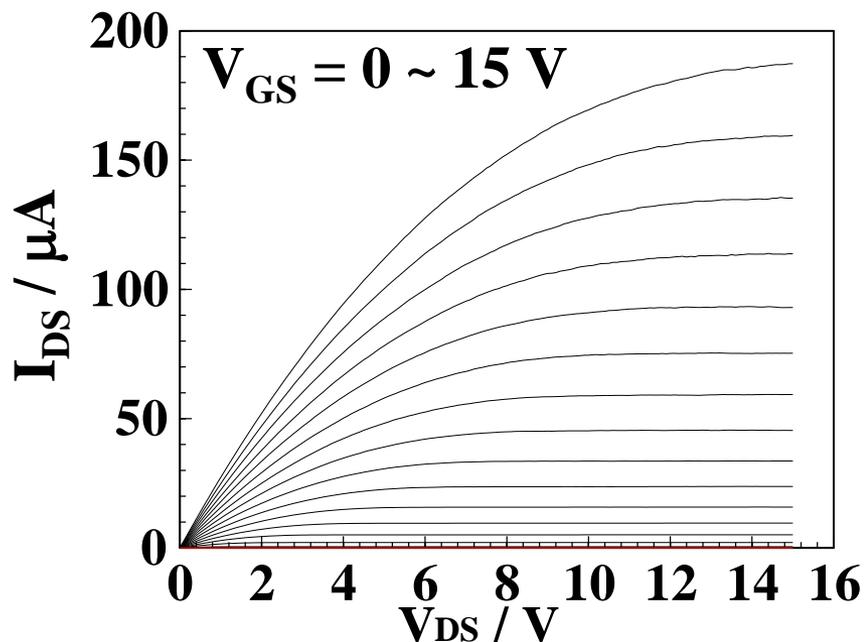
a-In-Ga-Zn-O TFT

$N_{e,Hall}$ (cm^{-3})	μ_{sat} (cm^2/Vs)	V_{th} (V)
$\sim 1 \times 10^{15}$	7.84	4.9

デバイスシミュレーション

n_0 (cm^{-3})	μ_{drift} (cm^2/Vs)
1×10^{15}	8.57

電界で誘起された
キャリアのうち12%
がトラップされている



FET特性の解析: 飽和領域

$$I_{DS} = \frac{W}{L} \mu C_{OX} \left[(V_{GS} - V_{th}) V_{DS} - \frac{V_{DS}^2}{2} \right]$$

$$V_{DS} > V_p = V_{GS} - V_{th}$$

$$I_{DS} = \frac{W}{2L} \mu C_{OX} (V_{GS} - V_{th})^2$$

$$I_{DS}^{1/2} = \sqrt{\frac{W}{2L} \mu C_{OX} (V_{GS} - V_{th})^2}$$

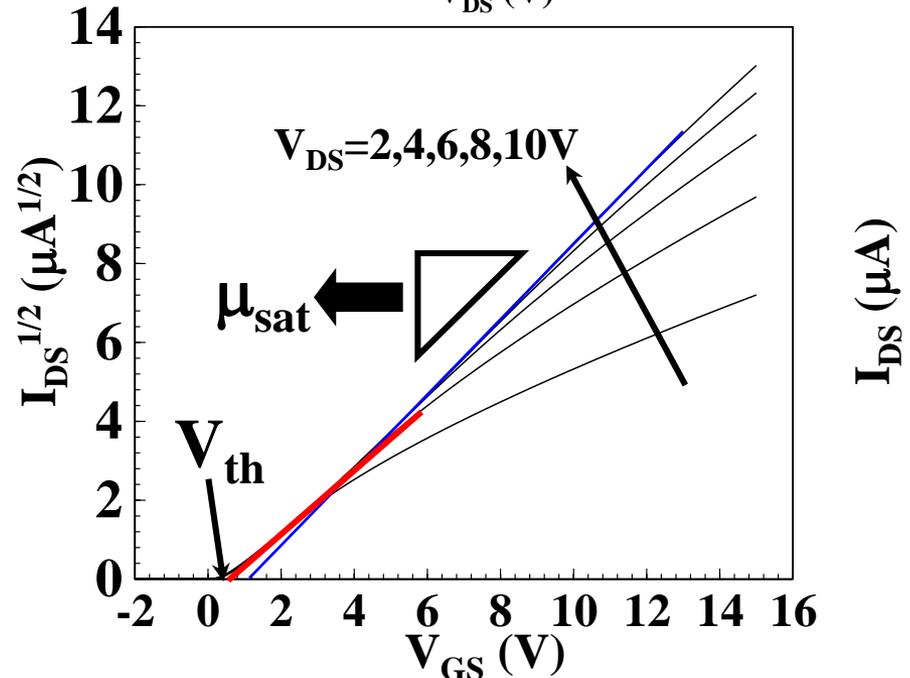
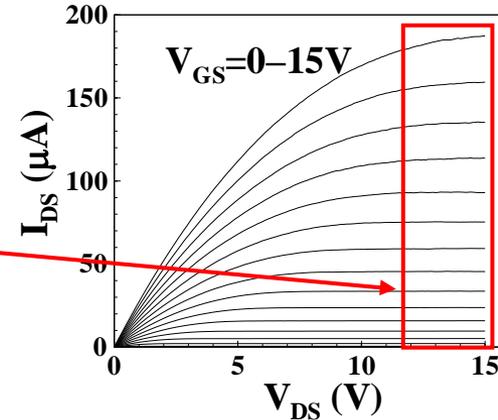
$I_{DS}^{1/2}$ vs. V_{GS} をプロット

V_{GS} 軸切片: V_{th}

傾き: 飽和移動度

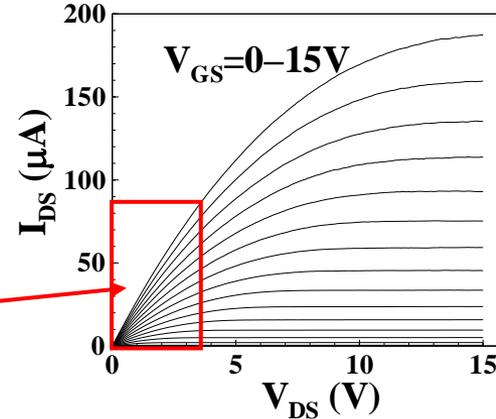
Saturation mobility, μ_{sat}

a-IGZO TFT



FET特性の解析: 線形領域

$$I_{DS} = \frac{W}{L} \mu C_{OX} \left[(V_{GS} - V_{th}) V_{DS} - \frac{V_{DS}^2}{2} \right]$$



$V_{DS} \ll V_p(V_{GS})$ (e.g., $\ll 0.1$ V)

$$I_{DS} = \frac{W}{L} \mu C_{OX} V_{DS} (V_{GS} - V_{th})$$

I_{DS} は V_{DS} に比例:
 I_{DS} vs. V_{GS} をプロット
 V_{GS} 軸切片: V_{th}
傾き: 線形領域移動度

有効移動度 (effective mobility): μ_{eff}

電界効果移動度 (field-effect mobility): μ_{FE}

$$\mu_{eff} = g_{DS} \frac{L}{WC_{OX}(V_{GS} - V_{th})}$$

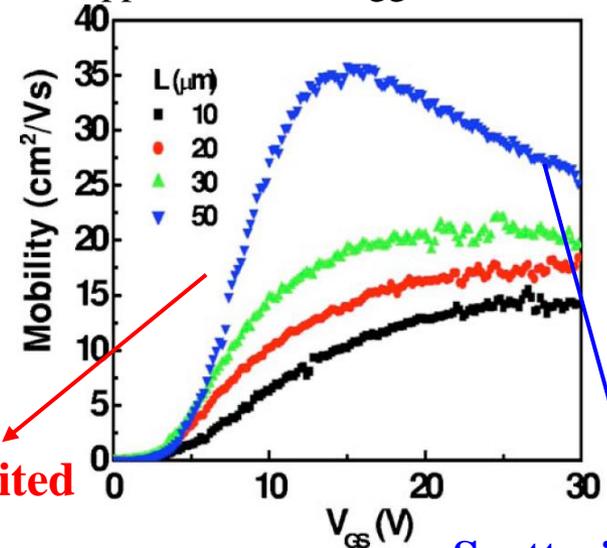
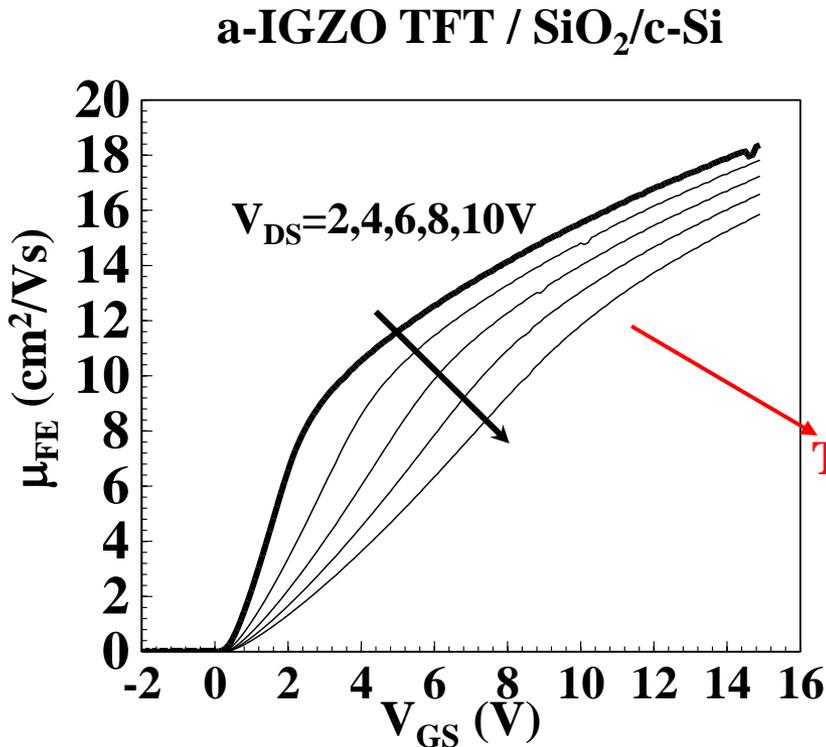
$$\mu_{FE} = g_m \frac{L}{WC_{OX}V_{DS}}$$

$$g_{DS} = \frac{dI_{DS}}{dV_{DS}} \quad \text{Drain conductance}$$

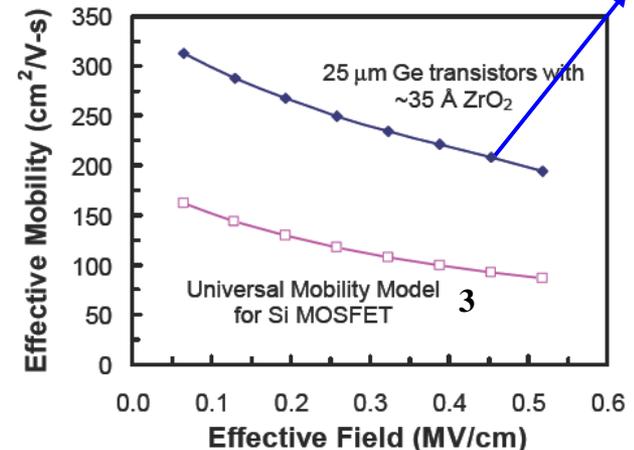
$$g_m = \frac{dI_{DS}}{dV_{GS}} \quad \text{Transconductance}$$

電界効果移動度の電界(V_{GS})依存性

a-IGZO TFT / $\text{SiO}_2/\text{MoW}/\text{glass}$ ¹
etch-stopper inverted-staggered



MOSFET ²



1. M.Kim et al., APL **90**, 212114 (2007)
2. C.O. Chui, H. Kim, D. Chi, B.B. Triplett, P.C. McIntyre, K.C. Saraswat, IEDM (2002) p.437
3. K. Chen, H. C. Wann, P. K. Ko, and C. Hu, IEEE Electr. Dev. Lett., **17**, 202 (1996)