

氏名・（本籍）	佐 ^さ 宗 ^{そう} 哲 ^{てつ} 郎 ^{ろう}
学位の種類	理 学 博 士
学位記番号	理博第 652 号
学位授与年月日	昭和 55 年 3 月 25 日
学位授与の要件	学位規則第 5 条第 1 項該当
研究科専攻	東北大学大学院理学研究科 （博士課程） 物理学第二専攻
学位論文題目	高濃度不純物半導体の電子構造と輸送理論
論文審査委員	（主査） 教 授 糟 谷 忠 雄 教 授 森 田 章 助 教 授 柳 瀬 章

論 文 目 次

Introduction.

Chapter I. Scattering Mechanisms in Heavily Doped Semiconductors. I. Maxima in Resistivity and Hall Coefficient.

§1. Introduction.

§2. The Thomas-Fermi Approximation.

§3. Self-Consistent Screening of Impurity Potentials in the Nonlinear Hartree and the Kohn-Sham Approximation.

§4.	The Temperature Variation of Resistivity and Hall coefficient in the RPA.
§5.	Discussion and Conclusion.
	Appendix A.
	Appendix B.
§6.	Supplement for the Nonlinear Screening of Impurities.
§7.	Renormalization of the Effective Mass.
§8.	The Energy Dependence of Relaxation Times.
	Appendix C.
§9.	Formation of Bound States.
§9.1	Formation of a bound state on a single impurity.
§9.2	Formation of a bound state on an impurity cluster.
Chapter II.	Scattering Mechanisms in Heavily Doped Semiconductors. II. Effect of Mass Anisotropy and Multiple Scattering.
§1.	Introduction.
§2.	Solution of the Boltzmann Equation.
§2.1	The variational method.
§2.2	Anisotropy of impurity potentials.
§2.3	Numerical solution of the Boltzmann equation.
§2.4	Results at zero temperature.
§3.	Effect of Finite Electron Life Time.
§4.	Resistivities and Hall Coefficients at Finite Temperatures.
§5.	Discussion and Conclusion.
	Appendix A. Expression for the Inverse Mass Tensor.
	Appendix B. Scattering by Phonons.
	Appendix C. Supplement for the Anisotropy of Relaxation Times.
	Appendix D. Supplement for the Effect of Finite Electron Life Time.
	Summary.
	Acknowledgement.

論文内容要旨

半導体に添加された不純物、例えばGeに添加されたSb、は、その濃度が薄い時には、各々孤立して浅い局在準位を禁止帯中につくる。しかるに順次その濃度を増してゆくと、補償によって空いている準位を利用して、局在準位にいた電子が結晶中を動き回るようになる。ただし、この電子の運動は格子振動の援けを借りて行なわれるので、絶対零度ではおこらない。さらに濃度を増してゆくと、局在電子間の波動関数の重なりが非常に大きくなり、ある臨界濃度(N_c)以上で金属中の電子のように絶対零度でも結晶中を動き回れるようになる。この状態を高濃度域または金属域という。また N_c でおこる変化を金属・非金属転移と呼ぶ。本研究は、この高濃度域での電子状態と輸送現象についての理論的研究である。以下では簡単のために、 n 型の場合に話を限る。

従来高濃度域での電気伝導は、伝導帯の下の局在準位がつながってできる「不純物帯」中でおこると考えられていた。その理由は、ホール係数の温度変化に極大が現れること、及び電気抵抗の温度変化に活性化型のふるまい(いわゆる ϵ_1)が残っているように見えることであった。(この2点は実は低濃度で顕著に見られる性質であって、そこでは明らかに、伝導帯の下に準位群が存在している。)しかるに他の実験、例えば電子比熱、圧電抵抗、de Haas-Shubnikov振動の周期等は、不純物帯は消失してしまって電子は伝導帯中に収まっているとする「縮退電子ガス・モデル」で N_c 近くまで十分良く説明できる。それならば、電気抵抗とホール係数の温度変化に見られるふるまいが、もしも縮退電子ガス・モデルによってうまく説明されれば、金属域についての統一的な理解ができることになる。本研究はこのような企図のもとに行なわれた。

Sbを添加したGeの電気抵抗の温度変化についてはさらに詳しい実験がなされていて、それによるとこの場合にもホール係数と同様に極大があり、その位置が、縮退電子ガス・モデルを仮定した時のフェルミ温度の0.7倍程度のところに系統的に現われる。このことも不純物帯モデルよりは電子ガス・モデルを示唆するように見える。

縮退電子ガスモデルでは、不純物はすべてイオン化していて、そのつくるポテンシャルは伝導電子によって良く遮蔽されており、電子は不純物には束縛されていないと考える。このような系を取り扱う最も簡単な方法は、遮蔽をThomas-Fermi近似で扱い、それによる電子の散乱を第1 Born 散乱で扱って、Boltzmann 方程式を用いて輸送係数を計算することである。ただし、GeやSiの場合にはフェルミ温度 T_f が N_c 近くでは高々数10kなので、遮蔽の温度依存性を考慮することが大事である。温度が T_f 程度まで上がると、遮蔽はかなり弱くなる。すなわち、不純物ポテンシャルの有効距離は長くなる。一方電子の平均のエネルギーは増大するから、電子の平均の波長は短くなる。もしも絶対零度で波長の方がポテンシャルの有効距離よりも長ければ、ある温度で両者が同程度になり、強い共鳴散乱がおこるので電気抵抗に極大が生ずるこ

とが予想される。実際、数値をあたってみると、確かにこのような状況になっていることがわかる。また、ホール係数にも極大が生じることが計算してみるとわかる。さらに、Geの $\langle 111 \rangle$ 方向に一軸性の飽和応力をかけると、縮重していた伝導帯のうち1つが下がって3つが上がり、電子は下がった谷に全部収まる。すなわち1谷の状態になる。このときはFermi準位が上がり、絶対零度での遮蔽距離と平均波長との関係が逆転して共鳴散乱はおこらなくなる。従って1谷の時は電気抵抗の温度変化に極大が生じないはずである。これも実験と一致する。

しかし、このような簡単な計算で実験の定性的な特徴は説明できても、定量的には全く不十分であり、このモデルが正しいと主張するには程遠い。現実のGeやSiはそれぞれの谷内で異方的な有効質量をもつ。またThomas-Fermiの遮蔽や第1Born近似では不十分であろう。そこで以下では種々の効果を総合的に取り入れて定量的にも満足のゆく計算を行なった。

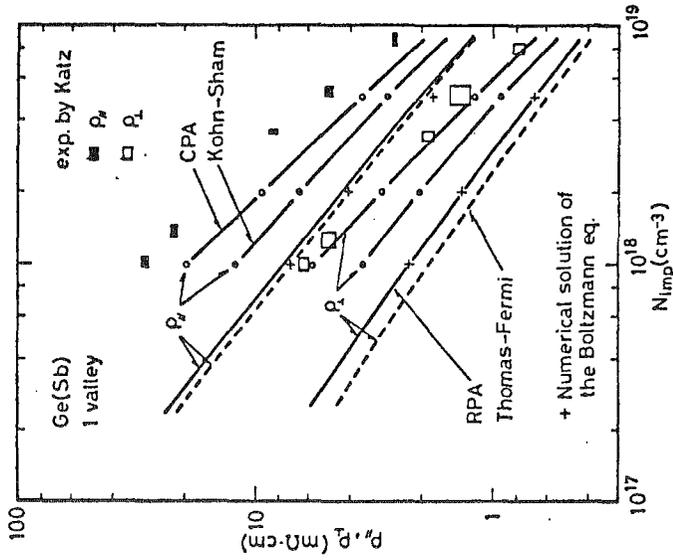
不純物の遮蔽と電子の散乱とは密接な関係があり(例えばFriedel 総和則)、互いに矛盾しないような計算をする必要がある。そこでまず絶対零度において、等方質量近似の下で摂動論によらない非線型遮蔽理論(Kohn-Shamの方法)によって、個々の不純物の遮蔽と散乱問題を数値計算によって自己無撞着に解いた。この時、電子間相互作用による多体効果も考慮に入れた。

有効質量の異方性のために、同時に遮蔽も異方的になる。このことを考慮に入れた遮蔽と散乱の計算を線型遮蔽(RPA)、Born近似の範囲で行ない、変分法を用いてBoltzmann方程式を解き輸送係数を求めた。さらに絶対零度の場合にはBoltzmann方程式を数値計算で直接厳密に解き、変分法の近似が今の場合非常に良い事を確かめた。この結果に、前述の非線型効果と多体効果を増強因子の形で取り込んだ。次に、複数不純物間の多重散乱の効果を、最も簡単なYonezawaの δ 関数ポテンシャルを用いたCPA(コヒーレント・ポテンシャル近似)理論によって評価した。ただし、ポテンシャルの強さを、多重散乱のくりこみを落とした時に上記の多重散乱を含まない計算値に一致するように決めた。

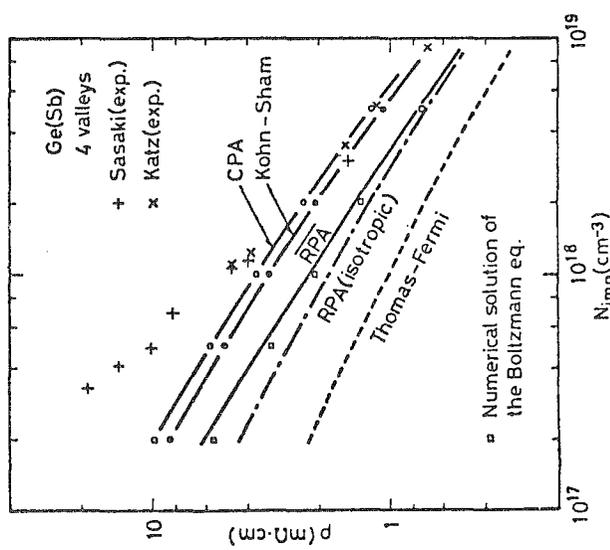
結果として、adjustable parameterを一際用いずに、Nc近傍を除いては、実験とよく一致する抵抗値を得た(第1, 2図)。有限温度の計算も行ない、実験にみられる電気抵抗とホール係数の極大をよく説明することができた。一軸性応力をかけた1谷の場合についても実験との一致は良い(第3, 4, 5図)。以上によって、従来不純物帯の存在に帰せられていた現象が、縮退電子ガス・モデルで定量的にも良く説明されることが示された。

しかし、Nc近傍では、実験との定量的一致は不十分である。これは、不純物クラスターによる散乱が寄与するためと考えている。縮退電子ガス・モデルでは、不純物は良く遮蔽されていて電子は束縛されていないとしているが、Kohn-Shamの方法による計算では、4谷の時には確かに金属域では束縛状態が出来ないが、1谷の時にはNc近くになると束縛状態が生じ、不純物帯となる可能性もある。

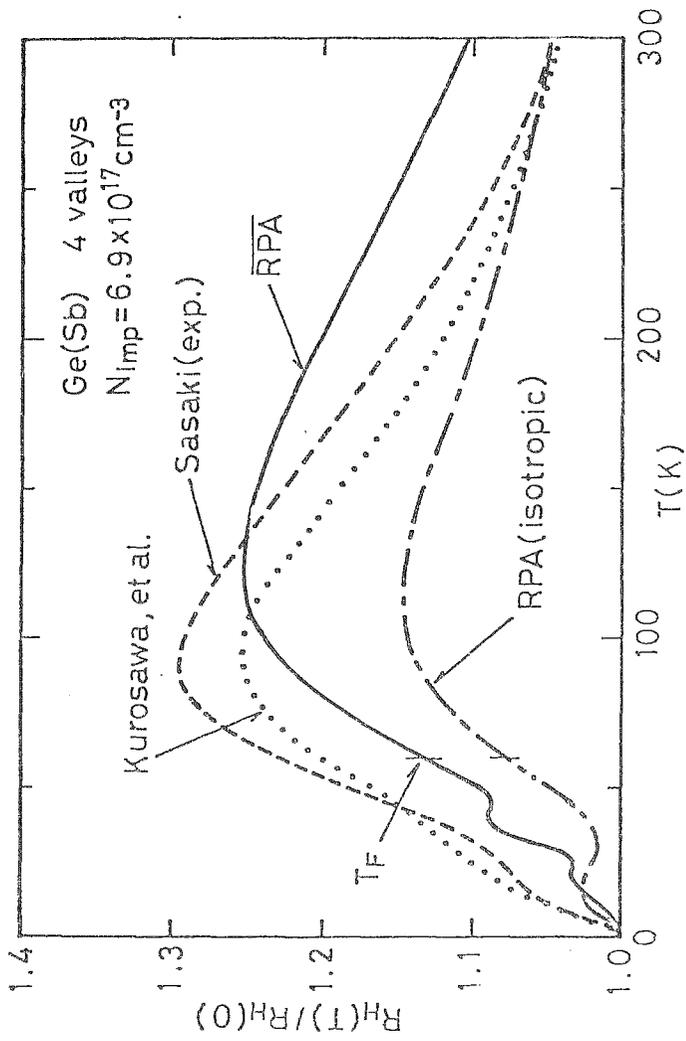
このように4谷の金属域では個々の不純物には束縛状態が出来ないが、しかし、1ヶ所にかたまった不純物のクラスター上には束縛状態ができる可能性がある。この束縛状態は電子間相互作用によって磁気モーメントを持つ可能性があり、これが、いくつかの実験によって主張されている「局在モーメント」であると考えられる。本論文では、簡単な近似でこのような局在モーメントの数を評価し、実験から推測されている数と概ね一致するような結果を得た。しかし、さらに詳細な計算を行なう必要があり、今後の課題である。このような局在状態が電子の散乱にも大きく寄与することが予想され、前記の N_c 近傍での定量的な不一致を改良してくれるものと期待している。



第 2 图



第 1 图



第 5 図

論文審査の結果の要旨

ゲルマニウムやシリコンにアンチモン等の不純物を一様にドーブすると伝導はホッピング型から複雑な中間濃度領域を経過して縮退半導体としての金属型伝導迄濃度の増大と共に変化していくが、特に金属-非金属転移近傍の濃度では複雑な様相を示し、金属-非金属転移の最も代表的例として古くから多くの研究がなされているが依然、その本質は解明されていない。

佐宗提出の論文は、この問題を高濃度金属域でよい近似である一体不純物散乱模型に立脚して、その立場でどこまで金属-非金属転移近傍の異常性質が説明できるかを詳細に調べたものである。先づ一体散乱のポテンシャルを決める電子遮蔽が散乱と矛盾なく決められねばならぬという立場を厳密に適用して第一ボルン近似及び厳密解を電子間相互作用をコーシーシャムの近似で取入れる立場で求めて従来行なわれてきたトーマスフェルミの近似と比較し、伝導帯の底が多谷になっている場合には本質的な相異が存在するが、一谷（これはゲルマニウムでも一軸性圧力を加えることにより実現される）の場合には相異は少ないことを調べた。次に、各伝導帯に強い異方性があることの遮蔽への効果をランダム位相近似の範囲で求め、特に一谷の場合に重要な効果を持つことを確かめた。更に多くの不純物からの多重散乱の効果をCPA 近似の範囲で評価し、やはり一谷の場合、重要な寄与をすることを得た。以上各効果をすべて考慮することにより、多谷の場合は臨界濃度の10倍、一谷の場合はそれよりかなり低い濃度以上の濃度では、抵抗、ホール効果の特徴ある温度変化、濃度依存性が絶対値まで含めてよく説明されること、又臨界濃度近傍では絶対値は合わなくなるが、特徴的溫度変化は非常によく再現することが得られた。この差は、不純物クラスター効果によると思われるが、本論文ではクラスターによる局在状態の存在確率を求めてそれを局在モーメントの実験と比較して、従来の孤立不純物模型より実験とより良く合うことを示し、クラスターの重要性を示した。

以上、佐宗は従来に比して飛躍的に精密な緒計算を行うことにより、不純物伝導の従来の考えをくつがえす種々の新しい重要な知見を得ることに成功し、この方面の研究に重要な寄与をなすと共に自立して研究活動を行なうに必要な高度の研究能力と学識を有することを示した。よって佐宗提出の論文は理学博士の学位論文として合格と認める。