

酸化膜界面近傍に局在する不純物による 散乱ポテンシャルの乱雑位相近似

Random Phase Approximation of Scattering Potential for Localized impurity near the Oxide Interface

筑波大応理¹, 筑波大数理², ○(B) 菅 吉朗¹, (P) 吉田勝尚², 佐野 伸行²

Univ. of Tsukuba¹, Inst. Appl. phys.², ○Yoshiro Suga¹, Katsuhisa Yoshida², Nobuyuki Sano²

E-mail: s1713069@s.tsukuba.ac.jp

【背景】半導体デバイスの基盤にドーパされた不純物の散乱ポテンシャルは、通常、キャリアによって遮蔽された湯川型ポテンシャルでモデル化されることが多い。この短距離ポテンシャルは境界のないバルクで良い近似となる。一方、デバイスサイズのナノスケール化や構造の立体化に伴って、界面や境界による散乱ポテンシャルの変調が顕著になると予想される。そこで、本研究では界面近傍に局在した不純物の作る散乱ポテンシャルに対する界面の影響を考察する。

【計算方法】Figure 1 に示すように、誘電率 ϵ_1 の半導体基盤上に、誘電率 ϵ_2 の酸化膜との界面から距離 a 離れた位置に不純物（電荷： e ）が局在した構造を考える。この構造のもとで不純物の作るクーロンポテンシャルを V_{ext} とすれば、半導体基盤のキャリアによって遮蔽された自己無撞着な散乱ポテンシャル V_{sc} は、乱雑位相近似を用いれば、波数空間で以下のように与えられる [1]。

$$V_{sc}(\mathbf{q}) = \frac{V_{ext}(\mathbf{q})}{\epsilon(\mathbf{q})} = \frac{e}{\epsilon_1} \frac{1 + \gamma(\mathbf{q})}{q_\rho^2 + q_z^2 + q_c^2 \{1 + \gamma(\mathbf{q})\} F(\mathbf{q})}$$

ここで、 $\mathbf{q} = (q_\rho, q_z)$ 、 q_c は Debye 遮蔽長の逆数、 $\epsilon(\mathbf{q})$ は界面での境界条件を考慮して乱雑位相近似から求めた誘電関数、 $F(\mathbf{q})$ は Lindhard 分極関数、 $\gamma(\mathbf{q})$ は界面に伴った因子で、 $\gamma(\mathbf{q}) = \alpha e^{-q_\rho a + i q_z a}$ ($\alpha = (\epsilon_1 - \epsilon_2) / (\epsilon_1 + \epsilon_2)$) である。上式を逆フーリエ変換することで実空間での散乱ポテンシャルが得られる。

【結果と考察】不純物と界面との距離を $q_c a = 0.1$ としたときの波数空間での散乱ポテンシャル $V_{sc}(q_\rho, q_z = 0)$ を q_ρ/q_c の関数として Fig. 2 に緑の破線で示す。界面のないバルク構造での乱雑位相近似から求めた遮蔽ポテンシャルを青の実線、界面の影響を考慮したクーロンポテンシャル V_{ext} をバルク構造での乱雑位相近似（界面の影響を考慮しない）で求めた誘電関数で遮蔽したときのポテンシャルをオレンジで示す。界面の影響を考慮した散乱ポテンシャル V_{sc} （緑破線）は、界面の影響を完全に無視したバルクでの遮蔽ポテンシャル（青実線）に非常に近いことがわかる。これは、

上式から明らかなように、界面に伴った因子 $\gamma(\mathbf{q})$ が長波長領域 ($q \ll q_c$) では打ち消し合うとともに、よく知られているように長波長領域で $F(\mathbf{q}) \approx 1$ となるためである。一方、境界の影響を含めない乱雑位相近似で求めた誘電関数で遮蔽したポテンシャル（オレンジ）は長波長領域で大幅に大きな値をとることがわかる。これは、界面に近接する不純物によって界面に誘起された分極電荷で、ポテンシャルの長波長成分が大幅に変調されることによる。物理的には、界面に非常に近い局在不純物の散乱ポテンシャルにおいて界面の影響が無視できるとは考えにくいことから、このような状況では線形近似である乱雑位相近似で散乱ポテンシャルを求めるのは困難であることが示唆される。

【まとめ】半導体と酸化膜の界面近傍に局在する不純物の散乱ポテンシャルを乱雑位相近似のもとで考察した。用いられる近似によって散乱ポテンシャルが大きく異なることを見出した。

【参考文献】

[1] N. Sano et al., Materials, 11, 2559. (2018)

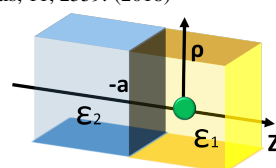


Fig 1: Schematic drawing of the interface between the different materials with ϵ_1 and ϵ_2 .

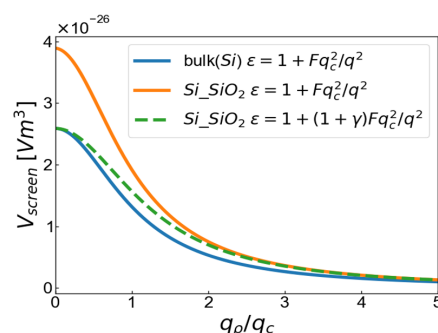


Fig 2: Scattering potentials in wave-vector space under three different approximations shown in the inset.