修 士 学 位 論 文

電界のみによるスピン分離観察を目指したInSb系共鳴トンネルダイオード設計に関する研究

指導教授　　　　須原　理彦　教授

　　　　　　　　斉藤　光史　助教

平成　29年　　2月　17日　　提出

首都大学東京大学院

理工学研究科　　電気電子工学　　専攻

学修番号　15882333

氏　名　　山口　翔二朗

学位論文要旨

半導体デバイスは微細化に伴い、動作の高速化、高性能化が実現されてきた。しかし、微細加工技術の限界に加え、ゲート長の短小化に伴い、量子効果の発現によりトランジスタとしての機能が低下してしまうなどの性能向上のための微細化に限界が近づいている。そこで、半導体デバイスの微細化限界を突破する案の一つとして電子スピンの磁性的な特徴を利用した半導体スピントロニクスデバイスの研究が進められている。半導体スピントロニクスを応用する上で、電子スピンの電界による操作と電子スピンの情報の維持が重要な技術となる。しかしこれらの定量的評価に関して未解明な点が数多いため、半導体スピントロニクスの研究は、電子スピンの制御、情報維持技術の確立を目指す基礎的な段階にある。

半導体中の電子スピン制御に密接に関わっているのが、電子の軌道運動と電子スピンの間に働くスピン軌道相互作用(SOI:Spin-Orbit Interaction)である。SOIが大きい場合、スピンの情報を維持する時間は短くなってしまうが、電子スピンの向きによるエネルギー的分離が大きく、電子スピンの制御性が高くなる。

現状、SOIに関して、デバイス中において電界のみよって発現するSOIの構造依存性が未解明である。また、スピン分離評価には外部磁場を用いてShubnikov-de Haas効果を利用した手法があるが、電界のみによるSOIの定量的評価が困難であることや浮遊磁場の影響を受けてしまう問題がある。

本研究では電界のみによるSOIの評価に着目し、Ⅲ－Ⅴ族化合物半導体の中で最もSOIの大きいInSbを採用し、測定モデルには、電界のみによるスピン分離評価をするために単一の量子井戸構造をもつ共鳴トンネルダイオード：RTD構造を採用した。RTDに対して電圧印加すると量子井戸内の電子に対してSOIが働き、有効磁場を感じることでエネルギー的にupスピンとdownスピンが分離し、それぞれの共鳴準位が分離する。このようにバンド構造の非対称性から生じるSOIをRashba効果と言い、その大きさをαとして、SOIにより生じるupスピンとdownスピンの共鳴準位のエネルギー差がスピン分離量となる。またRTDでの*J-V*特性には、共鳴準位を介した電子のトンネル現象により1つの凸が存在するが、理想的なスピン分離が得られた場合、共鳴準位のエネルギー的分離により*J-V*特性において2つの凸を観察できる。そのため、*J-V*特性を用いて電界のみによるスピン分離評価をする。

先行研究では、選択的なスピンの抽出が可能な三重障壁共鳴トンネルダイオード:TBRTDを用いて電界のみによるスピン分離評価を行い、十分大きなスピン分離が可能であることを示唆した。一方RTDは、TBRTDに比べ、簡易的な作製が可能だが、SOIが小さいことが課題である。そのため実際に電界のみによるスピン分離評価が定量的に行われた事例はない。

そこで本研究では、InSb系量子井戸中でのSOIの構造依存性解明と、電界のみによるスピン分離評価が可能な程十分大きいSOIを発現するRTD構造の提案を目的とした。

以下に、具体的な検討内容を述べる。最初に、ポワソン方程式とシュレーディンガー方程式のセルフコンシステントな計算からRTDのバンド構造と波動関数を抽出し、RTDの電流密度を計算するシミュレーションプロセスを確立した。本研究では、Rashba効果は、量子井戸内での内部電界から生じる効果と両界面での波動関数の非対称性とバンド不連続から生じる効果を分けて評価している。

次に、スピン分離観察可能な RTD 構造に関して検討した。検討の対象には、一般的な対称 RTD 構造と、より大きな SOI を実現するために井戸層にステップ層として AlInSb 層を挿入した非対称 RTD 構造を採用した。①対称 RTD 構造では α の井戸幅依存性、②非対称 RTD 構造では α の井戸幅とステップ層の高さ・幅依存性について系統的に検討した。更に、α の構造依存性から大きな α を示す対称/非対称 RTD 構造での *J-V* 特性を求めた。*J-V* 特性の共鳴準位幅 : Γ 及び電子供給層のフェルミ準位位置依存性からスピン分離観察可能性についての検討を行った。Γ に関して、先行研究で実測された InSb 系 RTD の *J-V* 特性のフィッティングから得た 5〜15[meV]を中心に、スピン分離による *J-V* 特性の特徴的な変化が見られるか考察した。

以上の検討より、本研究では、*J-V* 特性からのスピン分離評価を行うための一連のシミュレーションプロセスを確立し、対称/非対称 RTD 構造での α の構造依存性、電界のみによるスピン分離観察可能な構造、条件を示唆した。

本論文は全 5 章で構成されており、各章の概要は以下の通りである。

第 1 章では、序論として研究背景、研究目的について述べる。

第 2 章では、検討の対象としている RTD の動作原理、Ⅲ-V 族化合物半導体の特徴について述べる。

第 3 章では、スピン分離評価を行う上で用いる一連のシミュレーションプロセスについて述べる。

第 4 章では、対称/非対称 RTD 構造におけるスピン分離観察可能な構造の検討について述べる。

第 5 章では、総括として本研究のまとめと今後の展望を述べる。

ー目次ー

第一章　序論

1.1　半導体デバイスの微細化限界　…1

1.2　スピントロニクスの導入　…2

1.2.1　磁気メモリデバイス

1.2.2　スピントロニクスデバイス

1.3　スピン軌道相互作用(SOI : Spin-Orbit Interaction)　…4

1.3.1　原子に働くスピン軌道相互作用

1.3.1　半導体中におけるスピン軌道相互作用

1.4　研究目的　…9

第二章　Ⅲ-V 族化合物半導体の特性と電界のみによる SOI の評価原理

2.1　はじめに　…10

2.2　Ⅲ‐V 族化合物半導体の特性　…11

2.3　共鳴トンネルダイオード(RTD)　…15

2.4　RTD を用いたスピン分離評価原理　…17

第三章　評価のためのシミュレーションプロセスの確立

3.1　はじめに　…22

3.2　nextnano3 を用いたバンドシミュレーション　…23

3.2.1　1-バンドシミュレーション

3.2.2　8-バンドシミュレーション

3.3 スピン分離を考慮した電流密度の理論式導出　…27

第四章　スピン分離観察のためのRTD構造の検討

4.1　はじめに　…33

4.2　対称構造　…33

4.2.1　SOI の構造依存性

4.2.2　*J-V* 特性からのスピン分離評価

4.3　非対称構造　…36

4.3.1　SOI の構造依存性

4.3.2　*J-V* 特性からのスピン分離評価

4.4　*dJ/dV-V* 特性からスピン分離量評価のための理論式の導出　…47

第五章　総括

5.1　まとめ …50
5.2　今後の展望 …51
参考文献
謝辞

第一章

—序論—

1.1　半導体デバイスの微細化限界

半導体デバイスは 1947 年にトランジスタが発明されて以来､開発技術の向上に合わせて、応用分野の拡大に伴い、自動車や電気製品のほとんどに内蔵されるようになり、現在では私たちの生活に欠かせない存在になっている。

半導体デバイスの性能向上の上で、重要な技術となるのは「微細化(スケーリング)」であった。1965 年に Gordon Moore 氏によって発表されたスケーリング則に則った微細化に伴い、半導体デバイスは、動作の高速化、高性能化が実現されてきた。スケーリング即とは、1 チップに集積できるトランジスタ数は、2 年で 2 倍に増えるというものであり、半導体デバイスにおいて､素子サイズが$^{1}/_{k}$倍になった場合､表 1－1 に示すように､電源電圧､電流は$^{1}/_{k}$倍となるため消費電力は$^{1}/_{k^2}$倍となり、デバイスの集積度はk^2倍となることを示している。例えば MOSFET では、ソースから反転層であるチャネルを介してドレインに電子が流れるため、ゲート長を短くすることで、スイッチング素子として利用した場合スイッチング速度が増加する。現在では、MOSFET のゲート長は 7nm まで短小化を可能にしている。しかし、素子サイズが微小なことから基板上の集積密度は高くなり、パターンの線幅が狭いためフォトリソグラフィによる正確なパターンニングが難しくなり微細加工技術の限界が近づいている。加えて、デバイスのスケーリングに従ったゲート絶縁膜を薄膜化、ゲート長の短小化に伴い、電子のトンネル効果が発現することでスイッチの On/Off が難しくなりトランジスタとしての機能が低下してしまうなどの性能向上のための微細化に限界が近づいている。

そのため、現在ではこの半導体デバイスの微細化限界を突破するべく研究が進められている。広い分野で用いられる MOSFET において、微細化により発生する問題を改善するべく新構造のひとつとしてマルチゲート MOSFET が検討されている。この構造では、ゲートによるドレイン電流の電圧制御性が向上し、リーク電流の低減を見込むことができる。また主に車載用デバイスに用いられるパワー半導体デバイスでは、今まで Si が主な材料であったが、さらなるスイッチング速度の上昇、高耐圧化を目指し、SiC や GaN のようなワイドバンドギャップ半導体を用いた実用化が検討されている。半導体メモリデバイスでは、さらなる記憶容量の大容量化を目指し、NAND 型フラッシュメモリではこれまで構造が 2 次元であったものを 3 次元へと拡張する試みがなされ、実用化が検討されている。

表1－1　スケーリング則

パラメータ	スケーリング係数
素子サイズ	$1/k$
電源電圧	$1/k$
電流	$1/k$
容量	$1/k$
素子遅延	$1/k$
消費電力	$1/k^2$
回路面積	$1/k^2$
電力密度	1
配線抵抗	k
相対的な電圧降下	k
配線遅延	1
電流密度	k
電界強度	1

1.2　スピントロニクスの導入

半導体デバイスの微細化限界を突破するべく、世の中で挙がられている様々な提案に加えて、電子の磁性的な特徴を利用した「スピントロニクス」の導入が考えられている。そもそもスピントロニクスの始まりは磁性体中におけるスピン伝導を利用した磁気メモリ分野にあると言われている。その後、半導体中でのスピン伝導が注目を浴び、スピントロニクス分野の研究が進められてきた。スピントロニクスデバイスを実現することができれば、既存の半導体デバイスでは成し得ない、今までにない性能を付与することができると期待されている。

1.2.1　磁気メモリデバイス

半導体スピントロニクスの始まりは、磁気メモリの分野にあると言われている。それは、1857 年、William Thomson によって発見された磁気抵抗効果であった。しかし、当時は効果の影響が小さく、実用化にはいたらなかった。しかし、デバイスへ応用されるきっかけとなったのは 1988 年に Albert Fert (パリ第 11 大学)と Peter Grünberg (ユーリヒ固体物理学研究所)によって発見された Fe/Cr 人口格子における巨大磁気抵抗効果(GMR: Giant Magneto-Resistance)であった。磁気抵抗変化とは、磁場をかけることによって電気抵抗が変化する現象のことを言い、一般的な物質では、外部磁場による抵抗の変化率を示す MR 比

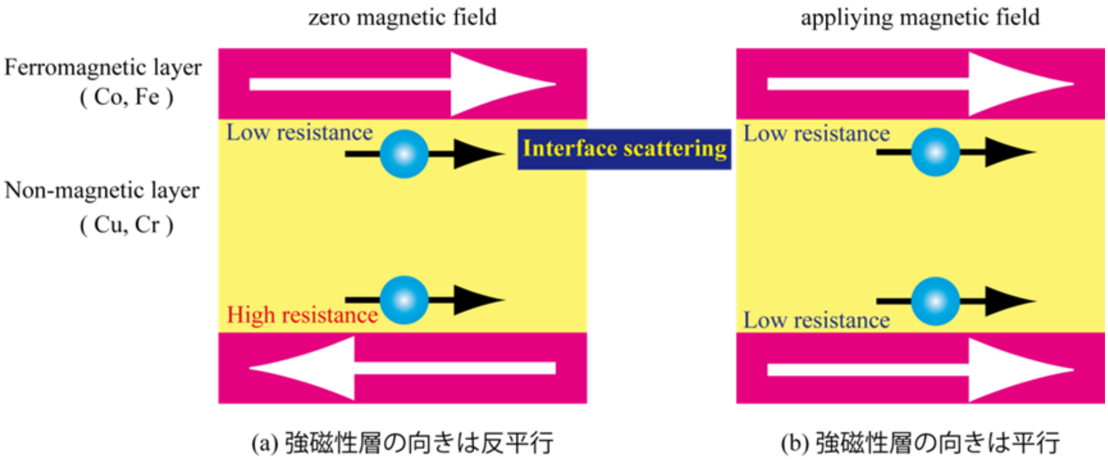

図 1－1　GMR 効果の概念図

が数%であった。しかし、GMR 効果では、10 数%にまで大きくなった。GMR 効果の原理は、強磁性体と非磁性体を nm オーダーで積層させた構造において、

①外部磁場が印加されていない時

図 1－1(a)のように、非磁性層を挟む両強磁性層の磁化の向きが反対である場合、強磁性層に対して反対の磁化を持つ電子は、その層を通る際に大きな抵抗を感じる。

②外部磁場が印加された時

図 1－1(b)のように、両強磁性層の磁化の向きが同じになるように外部磁場が印加された場合、強磁性層と同じ向きの磁化を持つ電子は、感じる抵抗が小さくなる。

GMR 効果は、HDD の磁気的な記録の読み出し部である磁気ヘッドに利用され、従来の磁気ヘッド(MR ヘッド)に比べ非常に高い MR 比を持つことから、これまでの HDD の記録密度を遥かに上回り、HDD の大容量化、低価格化の実現に貢献した。

その後、1995 年に宮崎照宣(東北大学)と Moodera(マサチューセッツ工科大学)らがそれぞれ独立して室温において MR 比＝18%という GMR 効果を超える MR 比を持つトンネル磁気抵抗効果(TMR：Tunnel Magneto-Resistance)を発見した。その後 TMR 効果は脚光を浴び、多くのグループによってさらに大きな MR 比を示すことが可能な TMR 効果が発見された。現在では、MR 比が、GMR 効果では数%～10 数%であったのが、TMR 効果では室温において 200～500%まで実現されている。そのため、HDD の磁気ヘッドや Magnetic Random Access Memory : MRAM のような不揮発メモリへの応用が研究されている。

GMR 効果の発見を皮切りに、磁性体中のみならず半導体中のスピンに依存した伝導現象が注目され始め、近年のスピントロニクスまで発展した。

1.2.2　スピントロニクスデバイス

半導体におけるスピンに依存した伝導現象が注目され始めてから、スピンの特性を用いた新動作原理のデバイスが考えられ、研究がなされている。代表的なものの一つとして、

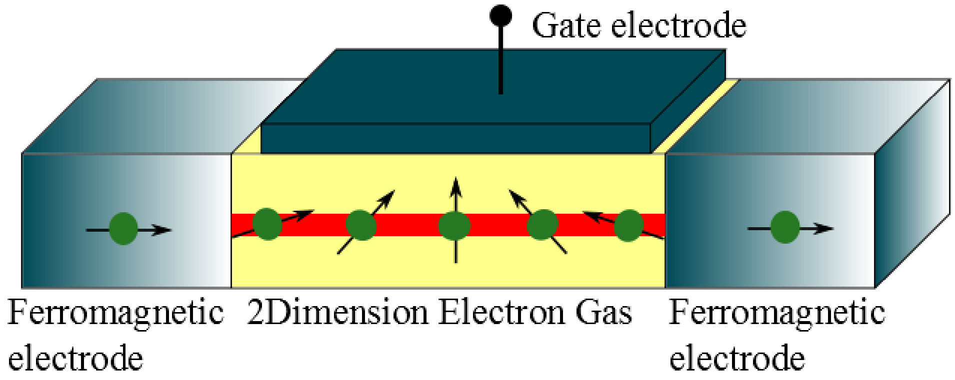

図 1－2　Datta-Das 型 Spin-FET

1990 年に S.Datta、B.Das(パデュー大学)らによって、MOSFET のように電子の量ではなく電子の持つスピンの向きによって電流の On/Off を制御する Spin-FET[1]が考案された。

図 1－2 に Spin-FET の構造を示す。Spin-FET の動作原理は、従来の FET とは全く異なる。図 1－2 に示すように、ソースの磁性体電極からスピン偏極した電子を注入し、チャネルとなる 2 次元電子ガスを介してドレインの磁性体電極へと流れる。2 次元電子ガス中では、ゲートから電圧をかけることにより半導体中において電子スピンが歳差運動するため、スピンの向きが変化する。そのため電流の On/Off はスピンの向きによって操作でき、磁性体電極の磁化と電子のスピンの向きが平行であれば電流は On、反平行であれば電流は Off となるのである。そのため Spin-FET では電子スピンの向きを変化させられるほどの小さい電圧をかけることで電流制御が可能になる。加えて、トランジスタとしての機能と、磁性体電極の磁化の書き換えを利用した不揮発性メモリとしての利用も考えられていることから単一素子での多機能化が実現でき、低消費電力での動作が可能であると期待されている。

半導体スピントロニクスを FET へ応用する上で、電子スピンの電界による操作と電子スピンの情報の維持が重要な技術となる。しかし、これらの定量的評価に関して未解明な点が数多いため、半導体スピントロニクスの研究は、電子スピンの操作、情報維持技術の確立を目指す基礎的な段階にある。

1.3　スピン軌道相互作用(SOI : Spin-Orbit Interaction)

半導体中の電子スピンの操作、スピンの情報維持に密接に関わっているのが、電子の軌道運動と電子スピンの間に働くスピン軌道相互作用である。

1.3.1　原子に働くスピン軌道相互作用[2]

まず、原子に働くスピン軌道相互作用について古典的に考える。電子(電荷-e ; e > 0)が電荷Zeの原子核から距離rのところを速度vで運動するとする。電子を原点とした座標系では、電子の周りを原子が$-v$で運動しているように見える。原子核の運動の作る環状電流が電子の位置に作る磁場は、ビオ・サバールの法則により、

$$\boldsymbol{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} Ze \frac{r \times v}{r^3} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{Ze}{m} \frac{\hbar \boldsymbol{l}}{r^3} \tag{1-1}$$

ここで、μ_0は透磁率、$\hbar \boldsymbol{l} = m\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{v}$は角運動量である。一方、電子のスピン s は、磁気モーメント$\boldsymbol{\mu_s} = -2\mu_B s$を持つので、磁場中のエネルギーとして、

$$-\boldsymbol{\mu_s} \cdot \boldsymbol{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{Ze^2}{m^2} \frac{\hbar}{r^3} (\hbar \boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s}) \tag{1-2}$$

となる。このときスピン軌道相互作用は電子の軌道運動と角運動の間の相互作用として考えることができるため、原子におけるスピン軌道相互作用は、

$$H_{\mathrm{SO}} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{Ze^2}{2m^2} \frac{\hbar}{r^3} (\hbar \boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s}) \tag{1-3}$$

と表現することができる。ただし、$\boldsymbol{l}$は軌道角運動量、$\boldsymbol{s}$はスピン角運動量、Zは原子の原子番号、eは電子の電荷素量、mは電子の質量、r原子から電子までの距離、cは真空中での光の速度である。また、電子の感じる電場

$$\boldsymbol{E} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Ze}{r^2} \frac{\boldsymbol{r}}{\boldsymbol{r}} \tag{1-4}$$

を用いると、

$$H_{\mathrm{SO}} = \frac{-e\hbar}{2m^2c^2} \boldsymbol{s} \cdot (\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{E}) \tag{1-5}$$

と表現することができる。

(1-3)、(1-5)式より、原子に限らず電場中において電子は有効磁場を感じ、SOI が働く。しかし、原子番号が大きい元素(白金や金、鉛)では顕著に表れるが、それらを除くと通常は非常に小さい。

1.3.1　半導体中におけるスピン軌道相互作用[2]

次に半導体中におけるスピン軌道相互作用について述べる。

価電子帯

GaAs や InAs などの多くの化合物半導体では、価電子帯の頂上付近が p 軌道から作られている。そのため、原子由来の SOI が働く。$H_{\mathrm{SO}} \propto \boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s}$は全角運動量$j = l + s$を導入すると、

$$\boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s} = \frac{1}{2}[(l+s)^2 - l^2 - s^2] = \frac{1}{2}(j^2 - l^2 - s^2) \tag{1-6}$$

と表現される。結果的に、p 軌道は$j = l + s = 3/2 (j_z = \pm 3/2, \pm 1/2)$, $j = l - s = 1/2 (j_z = \pm 1/2)$の 2 つに分類される。固体中のバンド構造は、$k \cdot p$摂動法により図 1−3 のように表される。SOI が働くことで、価電子帯の頂上である Γ 点付近で縮退が解け、$j = 3/2$と$j = 1/2$の 2 つに分かれ、後者を split-off バンドと呼ぶ。また前者は、Γ 点を離れるとさらに$j_z = \pm 3/2$の heavy-hole バンドと$j_z = \pm 1/2$の light-hole バンドの 2 つに分かれる。ここでの 2 つのバンドの"heavy"と"light"はそれぞれのバンドでの電子の有効質量の違いに起因している。

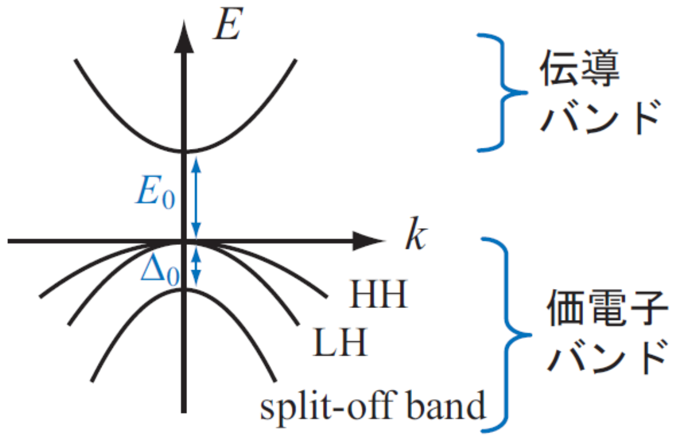

図 1－3　化合物半導体中における伝導体、価電子帯の概念図[2]

<u>伝導帯</u>

また、伝導帯の底付近は s 軌道から作られている。そのため角運動量はゼロであり、原子由来の SOI は小さく、通常は無視される。しかし、Ⅲ-V 族化合物半導体のような狭ギャップ半導体での伝導帯の電子には、バンド構造や結晶構造の影響によりスピン軌道相互作用が働く。バンド構造の非対称性から生じる SOI を Rashba 効果と言い、材料中の結晶構造による電子密度の非対称性から生じる SOI を Dresselhaus 効果と言う。

<u>Rashba 効果</u>

Rashba 効果は、AlGaAs/GaAs 量子井戸のような異種材料によるヘテロ接合によって生じる 2 次元電子系に対して垂直方向に電界をかけたときに電子に働く SOI である。

図 1－4 に電界のかかった量子井戸内での Rashba 効果の概念図を示す。量子井戸に対して$-x$方向に平行に電子が運動し、垂直に外部電界がかかっているとする。 (図 1－4(a))。電子を静止した座標系では、外部電荷がx方向に運動しているように見える。そのため、量子井戸に対して環状電流が流れ、有効磁場が発生する(図 1－4(b))。この有効磁場により量子井戸内の電子にスピン軌道相互作用が働き、有効磁場と同じ向きの電子スピンは高いエネルギーを持ち、反対の向きの電子スピンは低いエネルギーを持ち、電子の共鳴準位が分離する(図 1－4(c))。量子井戸に対して垂直な面内のすべての方向に同様に Rashba 効果が働き、スピン分離したときの$k_x - k_y$方向のフェルミ面は時計回りと反時計回りに分離する(図 1－4(d))。比較のために、Rashba 効果によりスピン分離した$E - k$分散関係とスピン軌道相互作用が無く、ゼーマン効果によりスピン分離した$E - k$分散関係を図 1－4(e)に示した。ゼーマン効果によりスピン分離した$E - k$分散関係は、「上下」に分離するのに対し、Rashba 効果によりスピン分離した$E - k$分散関係は「左右」に分離している。

1.2.2 節にて紹介された Spin－FET では、外部電界によって半導体中の電子スピンを制御することができる Rashba 効果を利用している。ゲート電圧の印加により、2 次元電子ガス中のバンド構造の非対称性から発現する Rashba 効果の大きさを制御し、電子スピンの歳差

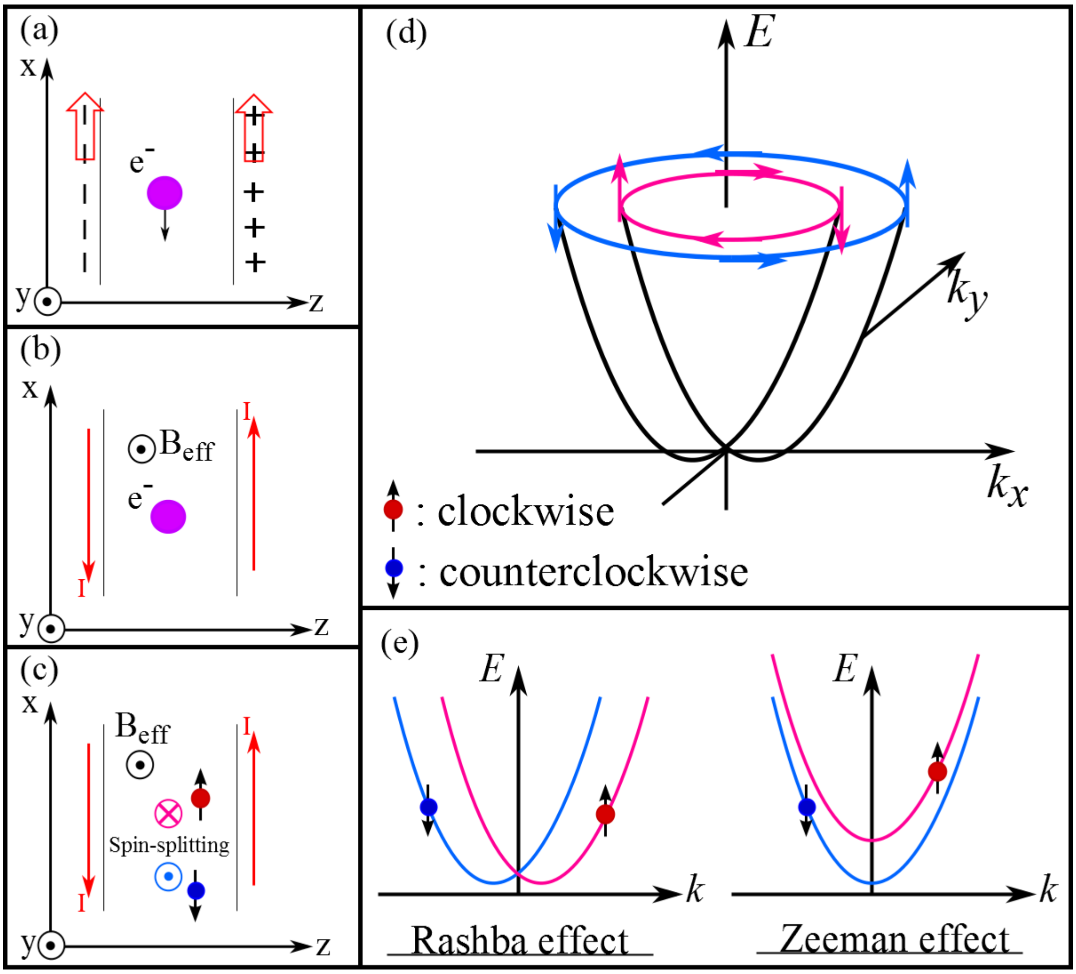

図 1－4　Rashba 効果の概念図と Zeeman 効果との比較

運動を制御することができるのである。

これまで Rashba 効果の大きさを測定する実験的手法は、Shubnikov-de Haas 振動を利用した測定方法[3-5]が主流であった。しかし、振動の読み取り方に任意性が高く、外部磁場を利用しているため正確なゼロ磁場でのスピン分離の大きさを測定することができないといった課題があげられる。

Dresselhaus 効果

Dresselhaus 効果は、Ⅲ-V 族化合物半導体中の結晶構造による電子密度の非対称性から生じる SOI である。そのため材料ごとに大きさが異なり、Rashba 効果はバンド構造の非対称性から生じるため、電圧制御によって大きさを調節することができるが、Dresselhaus 効果は結晶構造に依存しているため、材料ごとに値が異なり外部からの制御に不向きである。GaAs では Rashba 効果と Dresselhaus 効果は同程度の大きさであり、InGaAs や InSb では Dresselhaus 効果を無視できるほど Rashba 効果を大きくすることができる。

一般的にスピン軌道相互作用が大きい場合、電子スピンの制御性、電子スピンのエネル

ギー的分離は大きくなるが、スピンの情報を維持する時間が短くなると言われている。しかし近年では、Rashba 効果と Dresselhaus 効果を互いに打ち消し合うことで、スピン緩和時間が増大する永久スピン旋回(persistent spin herix)状態を形成することができることが判明した。2 次元電子ガス中においてゲート電圧制御による永久スピン旋回状態を形成することができれば、スピン緩和を抑制したことで長距離のスピン輸送、かつ、電子スピンの向きにより電流の On/Off を制御できるため、デバイス設計の自由度の向上、デバイス応用の拡大が期待できる。永久スピン旋回状態を形成するためにはそれぞれの効果が、互いに反対符号で、大きさが等しいことが重要となる。しかし Dresselhaus 効果が材料固有値であるが故に、バンド構造に起因した Rashba 効果と大きさを等しくするのは困難である。そのため、Rashba 効果、Dresselhaus 効果それぞれの大きさを正確に測定する手法の確立が要請されている。

<u>従来の SOI(Rashba 効果)の測定手法</u>

従来の SOI の評価手法には、

- Shubnikov-de Haas 振動を利用した測定手法
- 三重障壁共鳴トンネルダイオードを利用した測定手法　　が挙げられる。

Shubnikov-de Haas 振動を利用した測定手法とは、量子ホール効果を測定する系において外部磁場を印加することによって振動した磁気抵抗値が測定される。その結果一例を図 1－5 に示す[5]。その際、磁気抵抗振動の挙動の変化を観測することで Rashba 効果の大きさを評価する方法[3-5]である。しかし、

① 外部磁場を利用しているため正確なゼロ磁場でのスピン分離の大きさを測定することができない。

② 振動の観察のされ方にかなりの任意性が存在する　等の課題があるとされている。

また三重障壁共鳴トンネルダイオード(TBRTD : Triple Barrier Resonant Tunneling Diode)を利用した測定手法とは、高いスピン偏極率を示すことが可能な TBRTD を利用し、外部磁場レスでのスピン分離量を評価する手法である。非常に高い偏極率を示すスピン偏極電流を得られる。そのためスピン偏極した電子のみを取り出すスピンフィルタとしての活用も考えられている。先行研究[6]では、InSb 系 TBRTD を利用して検討し、90%以上のスピン偏極率を実現できることを示し、電界のみによるスピン分離量を評価できることを示唆した。しかし、大きなスピン分離を得るために狭い障壁層に対して高密度な p 型ドーピングをする必要があり、作製面において課題が残されている。

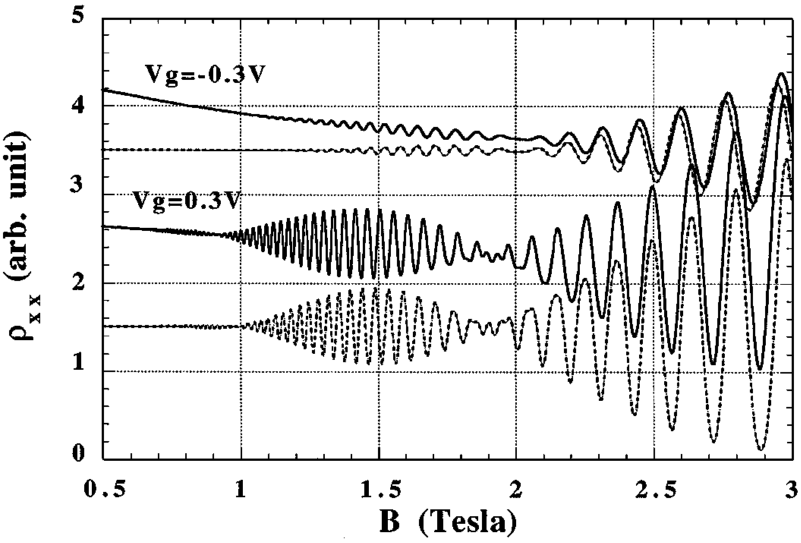

図 1－5　シュブニコフ・ド・ハース振動の実測と理論計算の比較

1.4　研究目的

本研究では、今後の半導体スピントロニクスデバイスへの応用を考えて、要請技術ともなる電界のみによる SOI の評価に着目した。材料には、Ⅲ-V 族化合物半導体の中で、最も SOI の大きい InSb を採用した。また、電界のみによる SOI を測定するために共鳴トンネルダイオード(RTD)を採用した。InSb は SOI が大きいことから材料的にも大きなスピン分離が期待できる。また、InSb 系材料での電界のみによる SOI の評価を目指し、SOI の構造依存性解明及びスピン分離観察が可能な InSb 系 RTD 構造の提案を目的として掲げた。そのために、量子井戸の内部電界に起因した SOI と、量子井戸両界面での波動関数の非対称性、急峻なバンド不連続に起因した SOI から生じる Rashba 効果によるスピン分離量の式を定義し[3]、スピン分離を考慮した RTD の *J-V* 特性を計算するシミュレーションプロセスの確立を目指した。そして、SOI の構造依存性を明らかにし、J-V 特性からスピン分離観察可能な RTD 構造の提案を目指した。

第二章

—Ⅲ-V 族化合物半導体の特性と

電界のみによる SOI の評価原理—

2.1 はじめに

これまで、電界のみによる SOI を評価した事例はない。そこで本研究では、Ⅲ－V 族化合物半導体の中で最も SOI の大きい InSb を用いて、電界のみによる SOI を評価するために共鳴トンネルダイオード(RTD)を採用し、電圧印加のみによる Rashba 効果の実験的な評価を目指した。

本章では、Ⅲ－V 族化合物半導体の特性、及び、RTD の動作原理を紹介し、RTD を用いたスピン分離評価原理について述べる。

2.2　Ⅲ－V 族化合物半導体の特性

2 種類以上の元素から成る化合物半導体には、多くの組合せがあり、さらに 2 種類以上の化合物半導体から成る混晶半導体では、組成比を変えることでバンドギャップなど様々な物性値を変化させることができる。そしてそれら化合物半導体や混晶半導体を組み合わせて積層させることで、数えきれないほどのデバイス構造を形成することができ、多種多様な機能を付与させることができる。その中で、Ⅲ－V 族化合物半導体とは、図 2－1 に示されるようなⅢ族半導体と V 族半導体を組み合わせた半導体である。Ⅲ－V 族化合物半導体は閃亜鉛型構造の結晶構造を持ち、各元素は正四面体配置をとっている。主な、Ⅲ－V 族化合物半導体には、GaAs や InSb、GaN などが挙げられ、用途として、LED や Photo Diode(PD),MOSFET のチャネルに用いられる。本研究では、GaAs を基盤として、InSb を量子井戸材料、AlSb と InSb の混晶である AlInSb をバリア材料として採用とした。

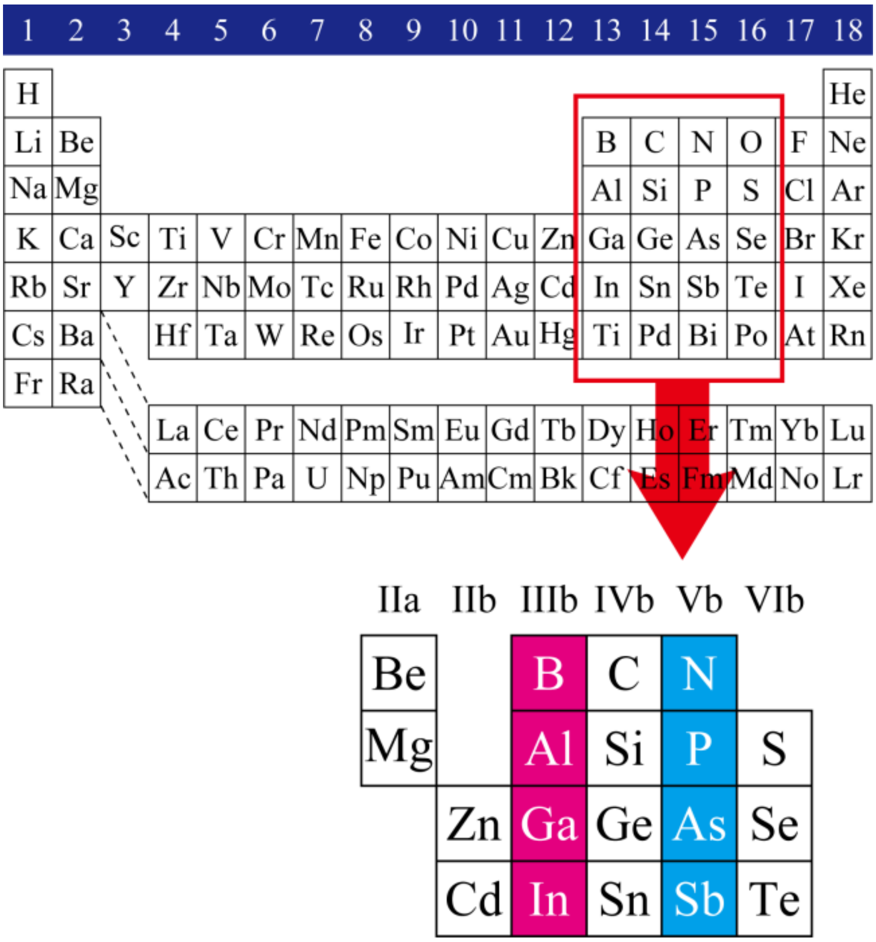

図 2－1　周期表

表 2－1　Si とⅢ - V 族化合物半導体の物性定数(室温)[6-7]

材料	電子移動度 μ_e[cm^2/Vs]	ホール移動度 μ_h[cm^2/Vs]	バンドギャップ E_g[eV]	格子定数 a[nm]	有効質量 m^*/m_0
Si	1500	450	1.12	0.5431	0.43
GaAs	8500	400	1.42	0.5653	0.067
InSb	76000	1250	0.17	0.6479	0.014
AlSb	900	400	1.696(X)	0.6135	0.39(X)
InAs	33000	460	0.36	0.6058	0.022
GaN	900	350	3.507	0.3189	0.20

InSb

InSb は直接遷移型であり、Ⅲ‐V 族化合物半導体の中で最もバンドギャップが小さい半導体である。狭ギャップ半導体である特性を活かした赤外線検出器や、ホール素子に用いられる。また InSb は、Γ 点での電子の有効質量は $0.014m_0$ と非常に小さいため、室温での電子移動度は約 76000[cm^2/Vs]となる。表 2−1 から分かるように、Si や他のⅢ‐V 族化合物半導体に比べ、非常に高いことが分かる。この性質を利用し、MOSFET のチャネル材料として InSb を利用し、低消費電力・高速動作が可能な FET の実現に向けた研究が進められている。

また、図 2−2 にⅢ‐V 族化合物半導体における SOI と諸スピン現象との相互関係について示す。InSb は最も SOI が強いため、電子スピンのエネルギー的分離、制御性に優れる。しかし、電子スピンの情報を維持維持する時間を示すスピン寿命は短くなる。Si は SOI が弱く、InSb と正反対の特性を示す。そのため半導体スピントロニクスデバイスへの利用という面から見ると、InSb は up スピンと down スピンの大きなスピン分離を得られることからスピンフィルタとしての利用、また電界のみによる電子スピンの制御を用いて Spin-FET への利用に期待されている。しかし SOI が強いが故にスピン緩和時間が短くなり、電子スピンの長距離輸送には不向きである。表 2−2 に InSb の物性パラメータを示す。

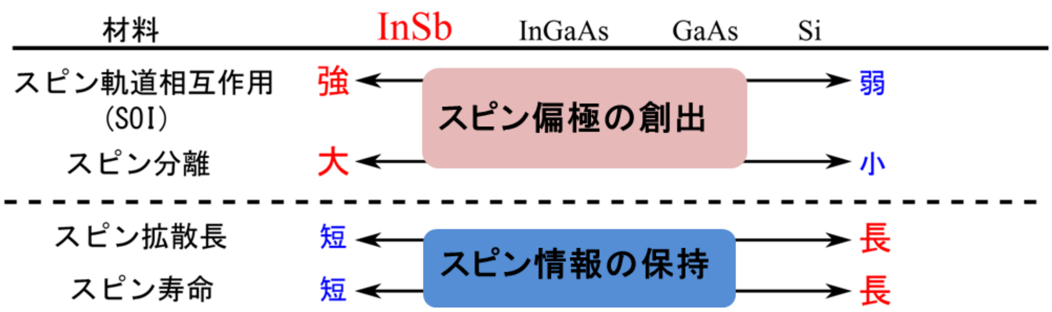

図 2−2　各材料でのスピン軌道相互作用と諸スピン現象との相互関係

表 2−2　InSb の物性パラメータ[7]

パラメータ		物性値	レンジ
格子定数	$\mathrm{a_c}$[Å]	$6.4794 + 3.48 \times 10^{-5}(T - 300)$	…
バンドギャップ	E_{g}^{Γ}[eV]	0.235	$2.35 - 2.39$
	$E_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}}$[eV]	0.63	$1.68 - 1.70$
	$E_{\mathrm{g}}^{\mathrm{L}}$[eV]	0.93	$2.327 - 2.329$
有効質量	$m_e^*/\mathrm{m_0}(\Gamma)$	0.0135	$0.012 - 0.015$
k･p パラメータ	E_p	23.3	…
$E - k$分散の 非放物線パラメータ	$\mathrm{a_{non}}[1/\mathrm{eV}]$	4.1	…

表 2−3　AlSb の物性パラメータ[7]

パラメータ		物性値	レンジ
格子定数	$\mathrm{a_c}$[Å]	$6.1355 + 2.60 \times 10^{-5}(T - 300)$	…
バンドギャップ	E_{g}^{Γ}[eV]	2.386	$2.35 - 2.39$
	$E_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}}$[eV]	1.696	$1.68 - 1.70$
	$E_{\mathrm{g}}^{\mathrm{L}}$[eV]	2.329	$2.327 - 2.329$
有効質量	$m_e^*/\mathrm{m_0}(\Gamma)$	0.14	$0.09 - 0.18$
	$m_e^*/\mathrm{m_0}(\mathrm{X})$	0.39	…
k･p パラメータ	E_p	18.7	…
$E - k$分散の 非放物線パラメータ	$\mathrm{a_{non}}[1/\mathrm{eV}]$	0.17	…

AlSb

AlSb は、間接遷移型の半導体であり、InSb と同様に閃亜鉛構造をもつ。AlSb 単体では、酸化されやすいため、空気中では劣化されやすく、デバイスへの応用は難しい。そのため、ヘテロ接合でのバリア材料や歪の影響を軽減するために基板材料として用いられる。AlSb の物性値は、室温での電子の有効質量は $0.39\mathrm{m_0}$であり、電子の移動度は 900[$\mathrm{cm^2/Vs}$]、また正孔の有効質量は、重い正孔が $0.94\mathrm{m_0}$、軽い正孔が $0.14\mathrm{m_0}$、正孔の移動度は 400[$\mathrm{cm^2/Vs}$]である。表 2−3 に AlSb の物性パラメータを示す。

Ⅲ‐V 族混晶半導体

混晶半導体とは、先にも述べたように、化合物半導体を 2 種類以上組み合わせた半導体

のことを示す。それぞれの材料の組合せの比率を示す組成比によって、混晶半導体のバンドギャップや格子定数を変化させることができる。この特性を利用することで、例えば、PD のような光検出器に混晶半導体を用いた場合、組成比を変化させるバンドギャップエンジニアリングにより、ひとつの材料を用いて幅広い波長帯域の光を検出することが可能にできるといったデバイスの応用範囲の拡大に繋がるのである。

図2－3にSi, Ge, Ⅲ‐Ⅴ族化合物半導体における室温での伝導体と価電子帯端のエネルギーと格子定数の関係を示す。デバイスを作製する際に、基板、それぞれの層の材料通しの格子整合性はデバイスの性能へ影響する。例えば、GaAs と AlAs の混晶である$\mathrm{Al}_x\mathrm{Ga}_{1-x}\mathrm{As}$であればそれぞれの格子間隔がほとんど等しいため格子整合を考慮する必要はない。しかし、GaAs と InAs の混晶である$\mathrm{In}_x\mathrm{Ga}_{1-x}\mathrm{As}$になると、InP 基盤を用いた時には格子整合を考慮すると、$x = 0.53$と一義的に決まる。

しかし、本研究で用いている InSb 系には格子整合をとることができる基盤が存在しない。そのため、材料間の格子間隔が合わないことから歪が生じてしまい、デバイスの性能を下げてしまうのである。この課題を解決するために、厚い InSb 層を挿入して基板とヘテロ接合の間に厚い InSb 層を挿入することで歪を干渉させて、ヘテロ構造へ影響を届かせないようにする必要がある。また、ヘテロ構造内にて、AlInSb と InSb の間にも格子不整合が生じてしまう。そのため。歪の影響を考慮した上でスピン分離観察のための RTD 構造を検討する必要がある。

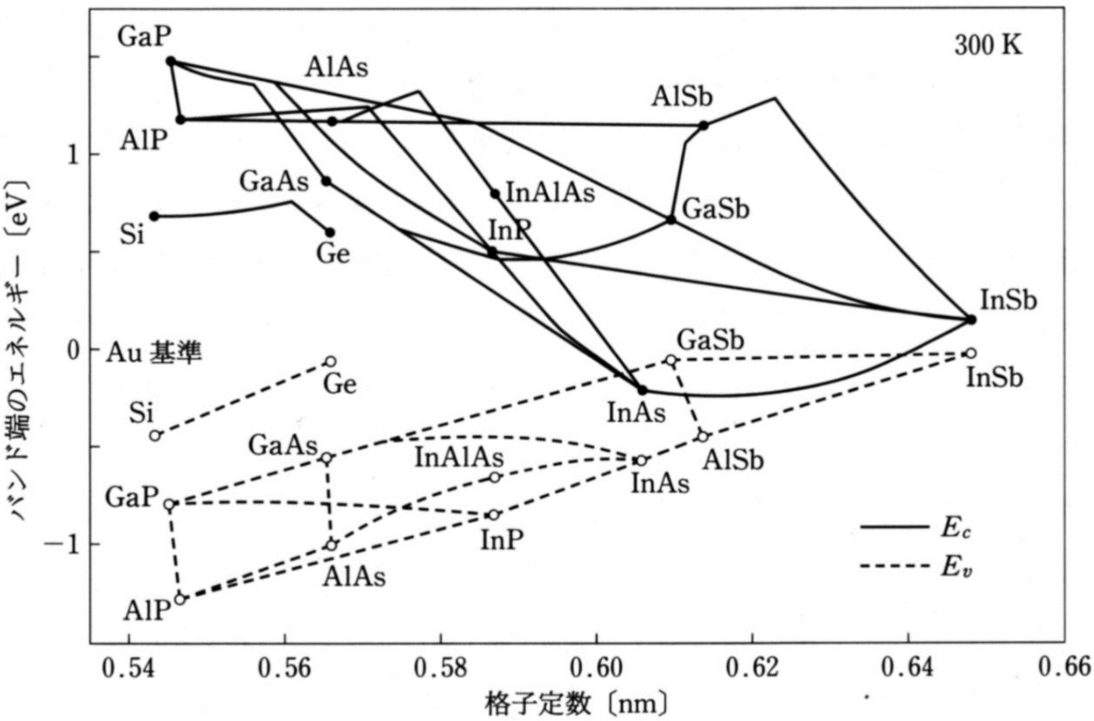

図 2－3　各種半導体におけるバンド端のエネルギーと格子定数の関係(T=300[K])

2.3 共鳴トンネルダイオード(RTD)

本研究では、電界のみによる SOI を評価するために RTD を採用した。RTD とはナローバンドギャップ半導体とワイドバンドギャップ半導体をナノメートルオーダーで積層させた構造を持つデバイスである。図2－4にRTDのバンド構造と本研究で用いた積層構造を示す。エミッタとなる Cap 層、コレクタとなる Buffer 層は、$2 \times 10^{18}\mathrm{cm}^{-3}$の n 型ドーピングがされた電子供給層となる。左右の Spacer 層の InSb は、一部に$2 \times 10^{16}\mathrm{cm}^{-3}$の n 型ドーピングがされており、電圧印加による形成される三角ポテンシャルの抑制する働きをもつ。RTD 構造部は、$Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ – InSb - $Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ で形成されている。$Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ に関して、量子閉じ込め効果を強めるために、AlSb の組成比を高くしたいが、高すぎると InSb との格子不整合により欠陥が入ってしまう。このトレードオフを考慮し、組成比を 0.5 とした。RTD は、量子井戸内に存在する離散的な共鳴準位を介して量子効果の一つであるトンネル効果

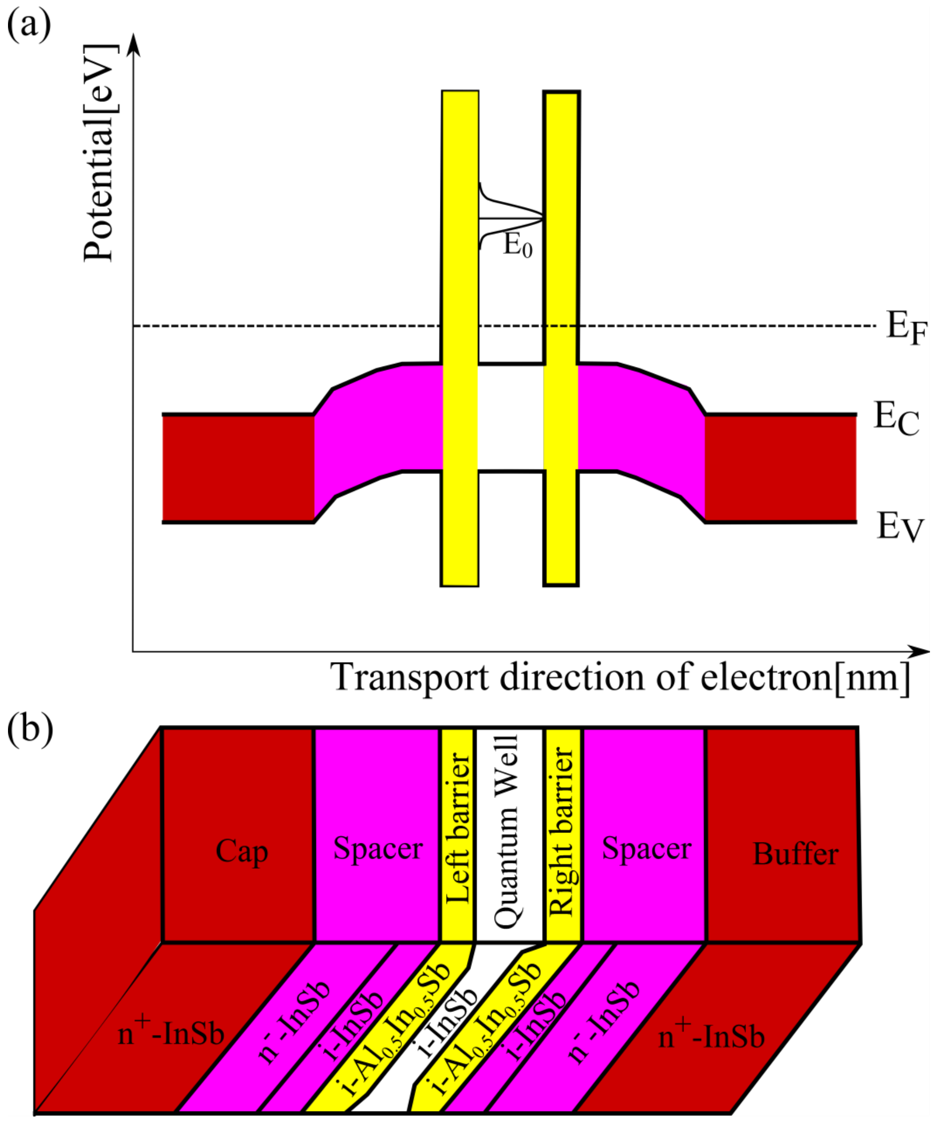

図 2－4　本研究で採用した RTD のバンド構造と積層構造

によって電子は運動するため、凸が存在する *J-V* 特性をもつ。トンネル効果とは、材料をナノメートルオーダーで積層することにより、電子は材料間を有限の確率で透過する現象のことである。また、量子井戸を通過する際には、共鳴準位を介するが、共鳴準位には幅が存在する。共鳴準位が幅を持つのは、量子井戸内での電子の散乱とヘテロ接合界面のラフネスに起因している。

RTD の動作原理を以下に示す。

①電圧印加なしの状態

図 2－5(a)に示すように、量子井戸内には、電子の閉じ込め効果により離散的な値をもった共鳴準位が存在する。またエミッタとコレクタには濃度の高いドーピングを施し、高濃度の電子で満たされている。

②順方向に電圧を印加した場合

図 2－5(b)に示すように、コレクタ側のポテンシャルが下がり、量子井戸内の共鳴準位も下がる。その際、共鳴準位がエミッタ側のフェルミレベルよりも下がったときにトンネル電流I_{tunnel}が流れ始める。

③さらに順方向に電圧を印加した場合

図 2－5(c)に示すように、さらに共鳴準位が下がり、共鳴準位がエミッタ側の伝導帯よりも下回ったときにI_{tunnel}は流れなくなる。以後、電圧をかけて共鳴準位が下がってもI_{tunnel}は流れなくなり *J-V* 特性に微分負性抵抗：NDR が形成される。

④トンネル電流が流れなくなり、さらに順方向に電圧を印加した場合

図 2－5(c)に示すように、共鳴準位がエミッタ側の伝導帯を下回った以後、エミッタからバリアを越えて流れる電流の熱電子放出成分$I_{thermal}$が支配的になる。

以上より、図 2－5(d)に示されるような *J-V* 特性が観測される。図 2－5(d)中の①～④は本文中のものと対応している。

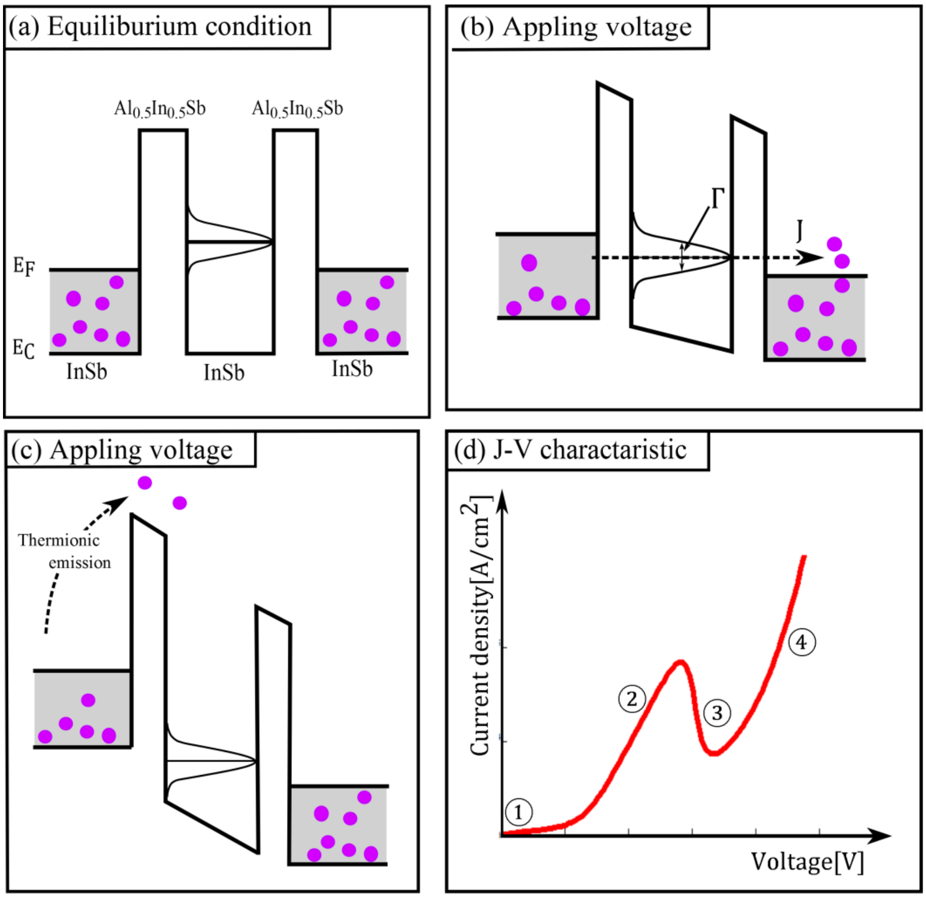

図 2－5　RTD の動作原理と J-V 特性の模式図

2.4　RTD を用いたスピン分離評価原理

将来的には、実験的に電界のみによる SOI を評価するべく、本研究では、スピン分離観察が可能な RTD 構造の検討を行った。そこで、RTD を用いたスピン分離評価原理について述べる。RTD は量子井戸を有しているため、電圧を印加することで、バンド構造が非対称となるため、Rashba 効果が発現する。この Rashba 効果により量子井戸内の up スピンと down スピンはエネルギー的に分離する。本研究では、up スピンと down スピンのエネルギー的分離をスピン分離と定義し、それぞれの共鳴準位のエネルギー差をスピン分離量：Δ とした。以下に、スピン分離を考慮した RTD の動作原理を示す。

①熱平衡状態

図 2－6(a)に示すように、量子井戸内に離散的な値をもった共鳴準位が存在し、エミッタとコレクタは高濃度の電子で満たされている。ここで、共鳴準位内、エミッタ、コレクタ内では up スピン、down スピンをもつ電子が縮退している。

②順方向に電圧を印加したとき

図 2－6(b)に示すように、コレクタ側のポテンシャルが下がり、量子井戸内に傾きが生じて

内部電界が生じる。この内部電界により Rashba 効果が働いて、電子の縮退が解け、共鳴準位がスピン分離をする。そして、down スピンの共鳴準位がフェルミレベルよりも下がるため down スピンのトンネル電流J_{down}が流れる。

③さらに順方向に電圧印加したとき

図 2－6(c)に示すように、down スピンの共鳴準位はエミッタ側の伝導帯よりも下に潜り込むため、J_{down}は流れなくなり、up スピンの共鳴準位がフェルミレベルよりも下がるため、up スピンのトンネル電流J_{up}が流れ始める。その後エミッタ側の伝導帯よりも下に潜り込んだときI_{up}は流れなくなる。

④熱電子放出成分

その後、さらに電圧を印加した場合電子がバリア層を越えて流れる電流の熱電子放出成分が支配的になる。

以上より、理想的なスピン分離を得られた場合、図 2－6(d)に示されるようなスピン分離を考慮した *J-V* 特性が観測される。図 2－6(d)中の①～④は本文中のものと対応している。

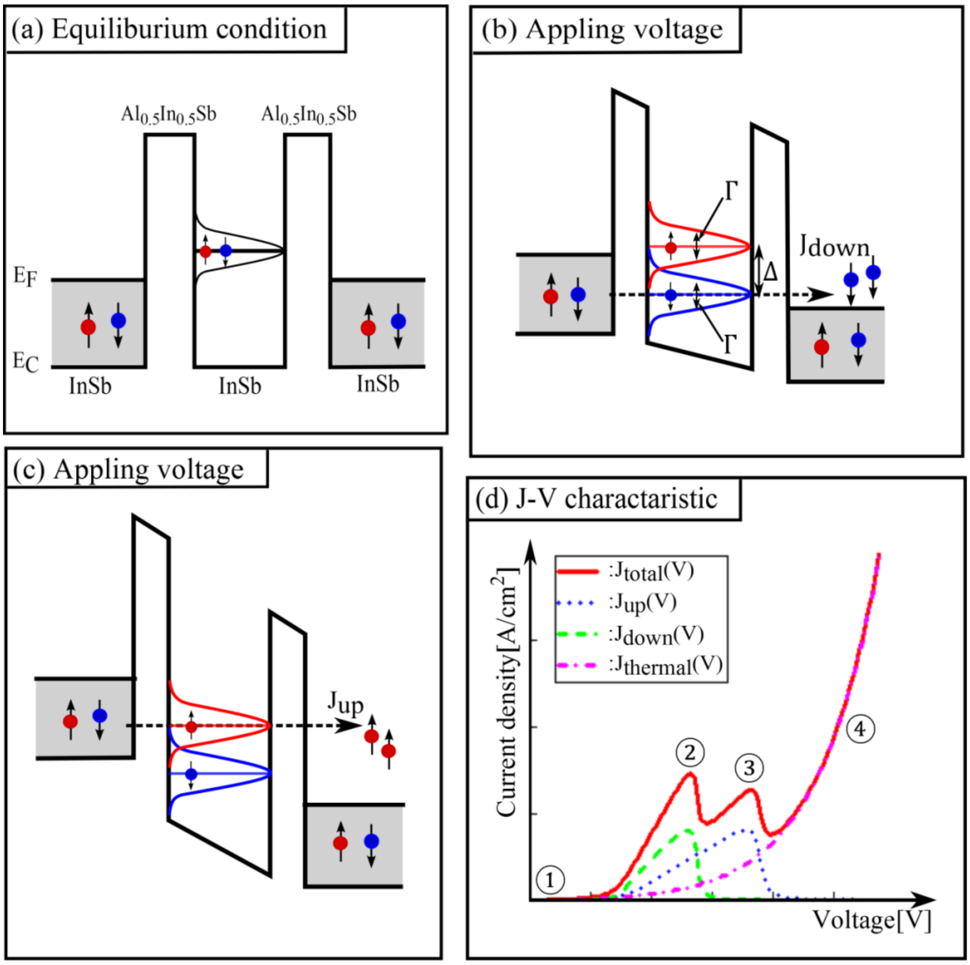

図 2－6　スピン分離を考慮した RTD の動作原理と J-V 特性の模式図

本研究では、電界のみによる SOI を評価するために RTD の *J-V* 特性を採用した。図 2−7 に理想的なスピン分離を得られた場合の *J-V* 特性と悪条件での *J-V* 特性の比較を示す。スピン分離を考慮した *J-V* 特性において、十分大きなスピン分離を得ることができれば、図 2−7(a)のようにスピン分離による 2 つの凸を観察することができる。このような J-V 特性を実験的に得られた場合、フィッティングから SOI を評価しようと考えている。そのため、J-V 特性から 2 つの凸が観察できる、つまり、スピン分離観察が可能な RTD 構造を検討する必要がある。図 2−7 に示すように、以下の場合、スピン分離観察は難しい。

- スピン分離量(∝SOI)が小さい
- Δ に対して共鳴準位幅：Γ が広すぎる
- スピン偏極電流が熱電子放出成分よりも小さい

共鳴準位幅が広すぎる場合、図 2−8 の示すようにスピン分離したそれぞれの共鳴準位の重なりが大きくなる。そのため十分なスピン分離が得られていてもスピン偏極電流の重なりが大きくなってしまいスピン分離観察が困難になってしまう(図 2−7(b))。また、SOI が小さい場合、スピン分離量も小さくなってしまうために、up スピンと down スピンの共鳴準位が重なってしまい、スピン分離観察が困難になってしまう(図 2−7(c))。また、スピン偏極したトンネル電流が熱電子放出成分に比べ小さい場合、トンネル現象による電流の変化を観察できず、スピン分離観察ができなくなってしまう(図 2−7(d))。以上より、スピン分離観察可能な RTD 構造の提案をするために、

- RTD 構造における SOI の構造依存性から SOI が大きい構造の提案
- 広い Γ でもスピン分離観察が可能かどうか
- 電流のピーク位置が適切かどうか

を検討する必要がある。

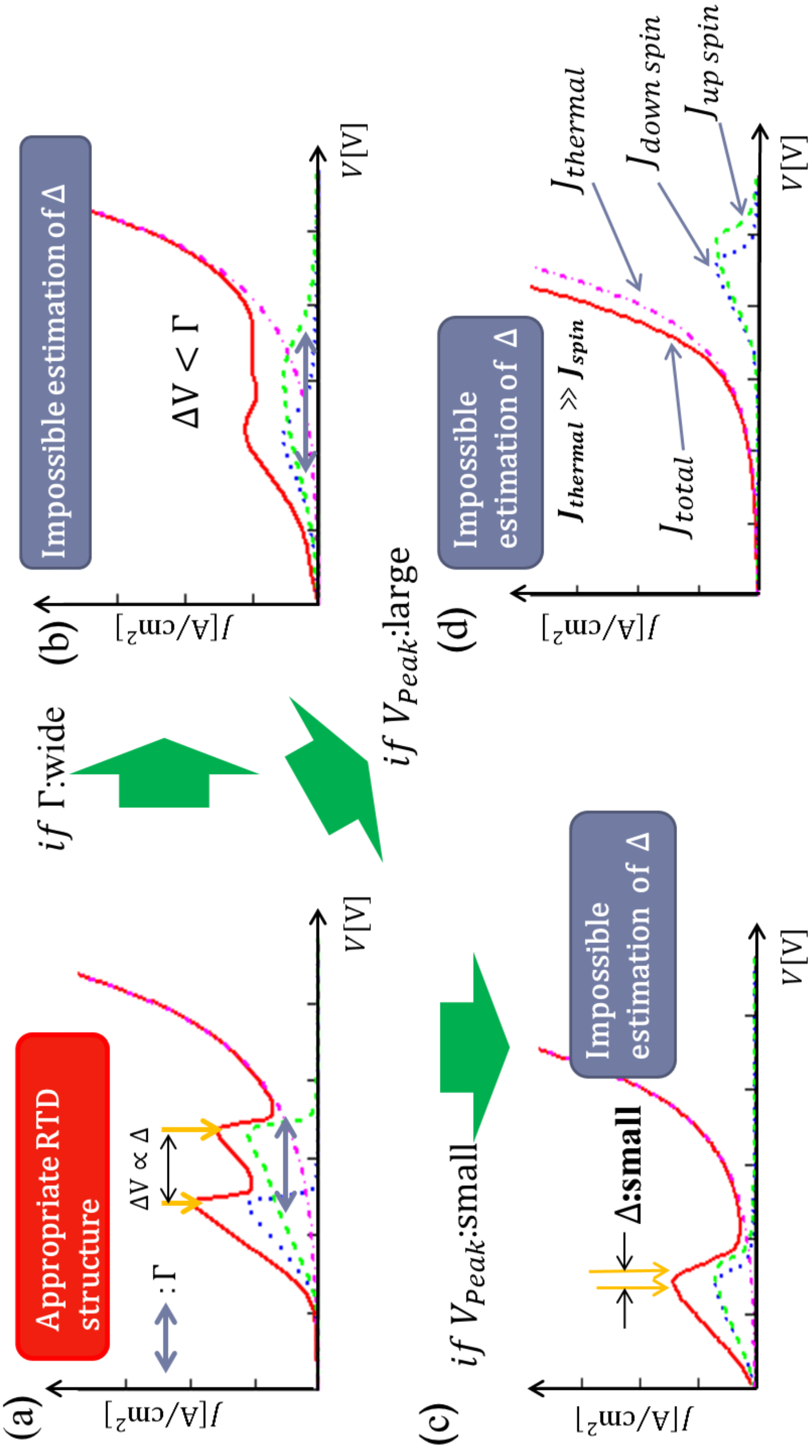

図 2−7　スピン分離を考慮した *J-V* 特性と諸パラメータの関係

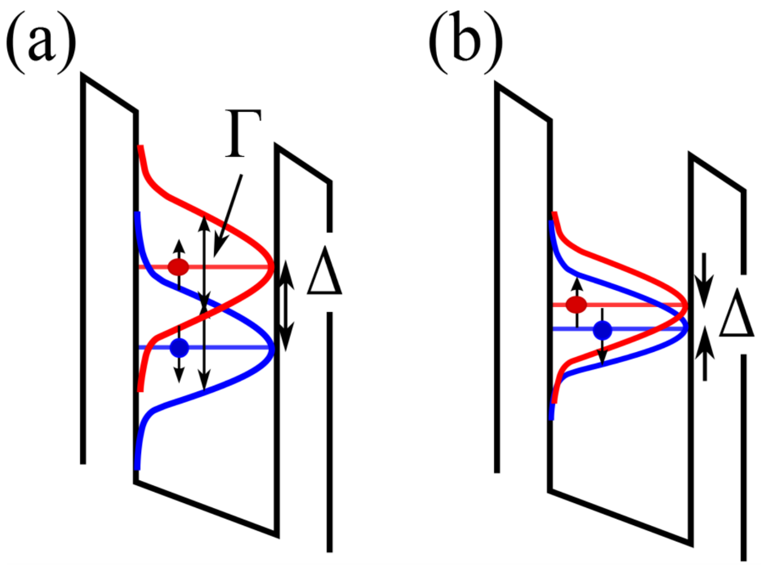

図 2－8　(a)広いΓのときのスピン分離した共鳴準位
(b)小さいΔのときのスピン分離した共鳴準位

第三章

—評価のためのシミュレーションプロセスの確立—

3.1　はじめに

本研究ではスピン分離観察可能な RTD 構造を検討するにあたり、図 3－1 に示す、スピン分離を考慮した *J-V* 特性を計算するための一連のシミュレーションプロセスを確立した。まずバンドシミュレーションから所望の RTD 構造におけるバンドパラメータと量子井戸内の電子確率密度の電圧依存性を抽出し、それらの値を用いてスピン分離を考慮した *J-V* 特性の計算をする。また、放物線近似による *E-k* 分散関係を用いた 1-バンドシミュレーションと、より厳密なシミュレーションをするために非放物線成分を考慮した *E-k* 分散関係を用いた 8-バンドシミュレーションを用いてスピン分離を考慮した *J-V* 特性を計算した。

そこで、本章ではバンドシミュレーションに用いた「nextnano3」について述べ、スピン分離を考慮した *J-V* 特性の理論式の導出について述べる。

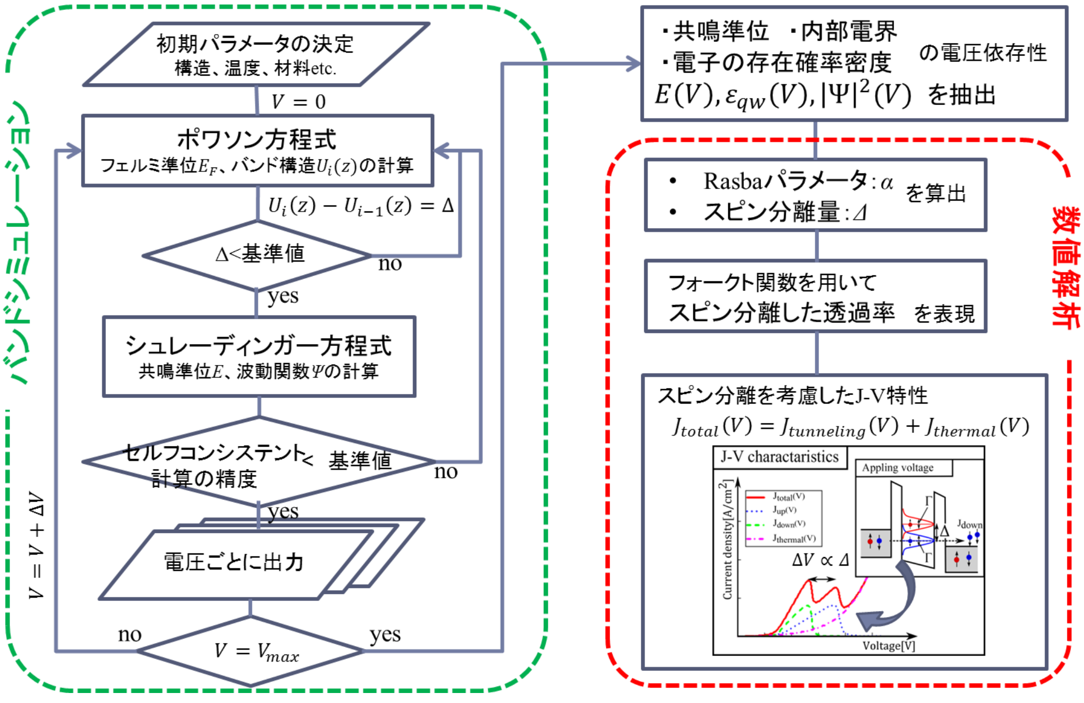

図 3－1　スピン分離を考慮した *J-V* 特性を計算するための確立した一連シミュレーションプロセス

3.2　nextnano3 を用いたバンドシミュレーション

まず本研究では、スピン分離を考慮した *J-V* 特性を計算するために、「nextnano3」を用いてバンドシミュレーションをした。以下に、バンドシミュレーションの計算プロセスを示す。

①　与えられた初期条件(温度、印加電圧、材料、構造)から初期バンド構造を計算。

②　初期バンド構造においてシュレーディンガー方程式を計算。
　　エネルギー準位、準位ごとの波動関数を算出。

③　算出された波動関数から各領域の電子密度$\rho(z,t)$を算出。

④　③で算出した電子密度を用いて、ポワソン方程式からポテンシャルU_iを算出。

⑤　④で算出したポテンシャルU_iにおいてシュレーディンガー方程式を計算。
　　共鳴準位、準位ごとの波動関数、フェルミ準位を算出。

- 計算精度が基準値以上ならば③へ戻り、基準値を下回るまで繰り返し計算。
- 計算精度が基準値以下ならばパラメータを決定。$V_i = V_{i-1} + \Delta V$として③へ

ここまでの計算をセルフコンシステント(自己無撞着)計算と言い、ポワソン方程式とシュレーディンガー方程式のセルフコンシステントな計算から RTD のバンド構造と波動関数を抽出した。

Nextnano3 では、表 3－1 に示すようなパラメータを設定し、シミュレーションをする。またシミュレーションモデルには、2 種類用いた。伝導帯・価電子帯を独立したモデルとする 1-バンドモデルとより厳密なバンドシミュレーションをするために *E-k* 分散の非放物線成分を考慮できる 8-バンドモデルを用いた。

表 3－1　nextnano3 に用いるパラメータ

構造パラメータ	材料、材料幅、ドーピング濃度、ドナー準位、組成比、有効質量、伝導帯、価電子帯端エネルギー
シミュレーションパラメータ	電子・ホールの量子モデル、ドリフト拡散モデル、シミュレーション次元、境界条件、量子計算領域、印加電圧、温度、

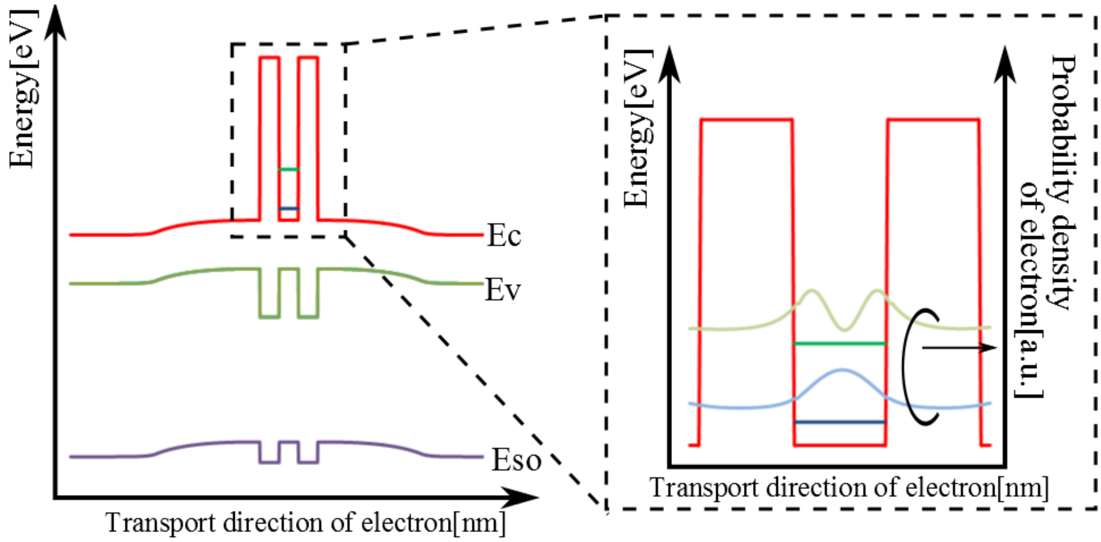

図 3－2　1－バンドモデルによるバンド構造と量子井戸内の電子確率密度

3.2.1　1-バンドシミュレーション

図 3－2 に、1-バンドモデルによる RTD のバンド構造と量子井戸内の電子確率密度のシミュレーション結果の例を示す。設定された初期パラメータにより、伝導帯、軽い正孔帯、重い正孔帯、スプリットオフ帯が算出される。ただし、軽い正孔帯は重い正孔帯と重なっている。電子確率密度に関して、設定された量子計算領域とエネルギー準位数に応じて、エネルギー準位、電子確率密度が算出される。

また、InSb/AlInSb 系 RTD 構造では、格子不整合系であるため、AlInSb と InSb の間に歪が生じてしまう。そのため、本研究では歪の影響を考慮したバンド構造から SOI を計算し、SOI への歪の影響を検討した。図 3－3 左に、歪を考慮していない場合のバンド構造、右に歪を考慮したバンド構造のシミュレーション結果例を示す。InSb/$Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ 系に対して歪を考慮した場合、バリア材料である AlInSb に対して引っ張り歪が生じ、バンドパラメータが変化した。伝導帯に関して、無歪の場合$\Delta E_c = 0.7611\mathrm{eV}$ ($\Delta E_c = E_C(\mathrm{Al_{0.5}In_{0.5}Sb}) - E_C(\mathrm{InSb})$)であったが、歪を考慮した場合$\Delta E_c = 0.5755\mathrm{eV}$となった。また価電子帯に関して、軽い正孔帯と重い正孔帯の縮退が解け、軽い正孔帯が上側に形成されるという結果となった。この結果は、実験的に InSb/$Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ 系 RTD での J-V 特性を測定した先行研究[10]における結果と符合していたため、妥当であると判断した。ただし、本研究では SOI の計算に価電子帯の値を用いる際、重い正孔帯と軽い正孔帯の平均値を用いている。

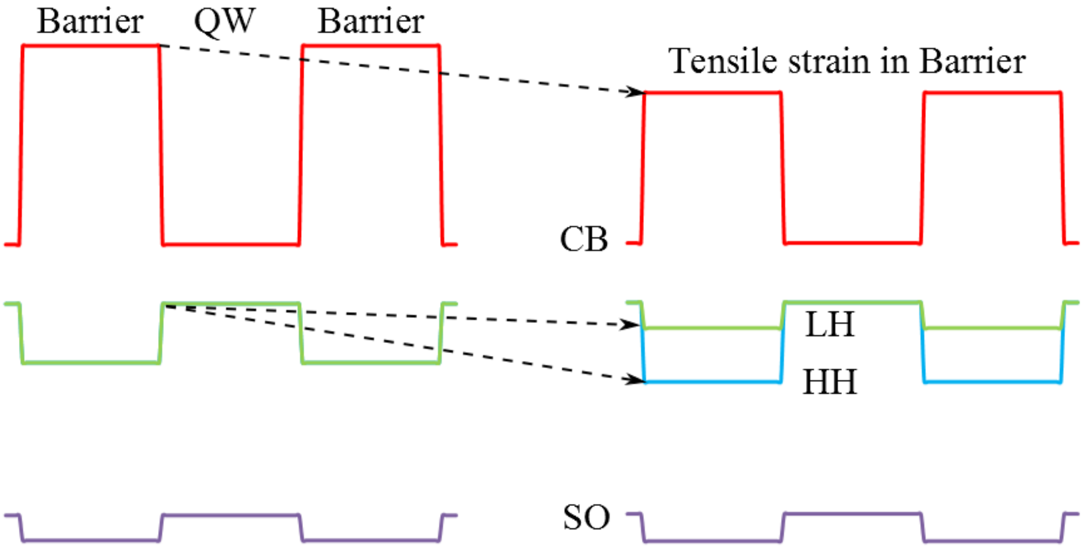

図 3－3　歪を考慮したバンド構造のシミュレーション結果例

3.2.2　8-バンドシミュレーション

Nextnano3 では、8-バンドモデルを用いることで、*E-k* 分散関係の非放物線成分の影響を考慮することができる。図 3－4 に、8-バンドモデルによる InSb/$Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ 系量子井戸内の電子確率密度のシミュレーション結果例を示す。図 3－5 に放物線性 *E-k* 分散と非放物線性 *E-k* 分散の比較を示す。図 3－5 のように *E-k* 分散関係の非放物線成分を考慮することで、*E-k* 分散グラフの曲率が小さくなるため、有効質量が大きくなることが知られている。そのため、共鳴準位は低くなることが予測される。さらに、他の研究グループ[9]の結果より、InSb 系量子井戸では、基底準位の高さはほとんど変わらず、第二準位以上が著しく下がることが示されている。図 3－4 より同様の傾向が見られるため、結果は妥当であると判断した。

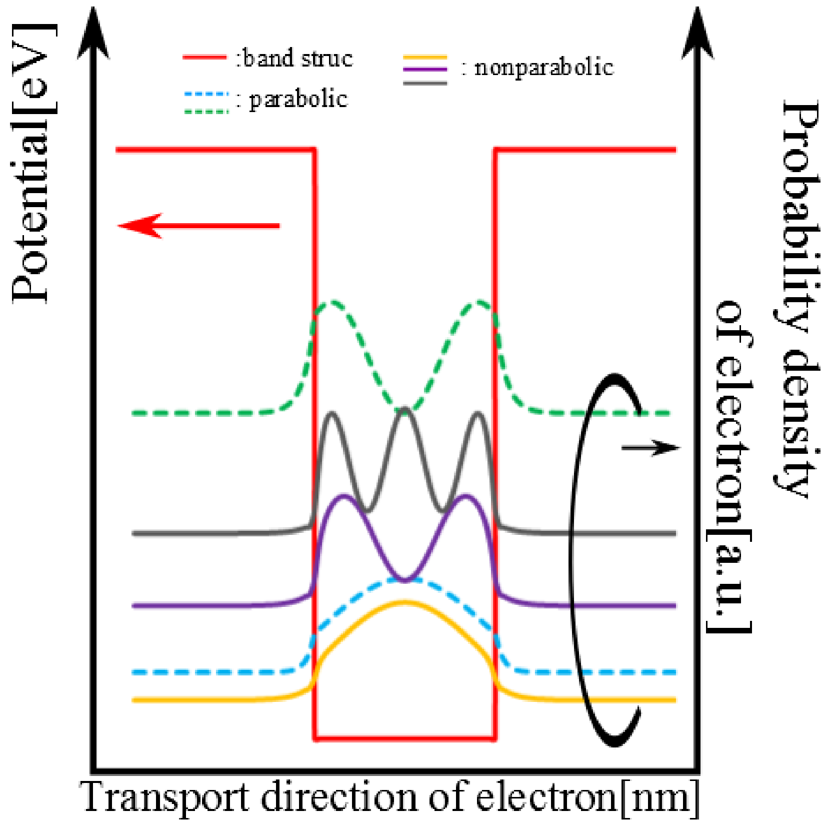

図 3－4　8-バンドモデルによる InSb/$Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ 系量子井戸内の電子確率密度の結果例

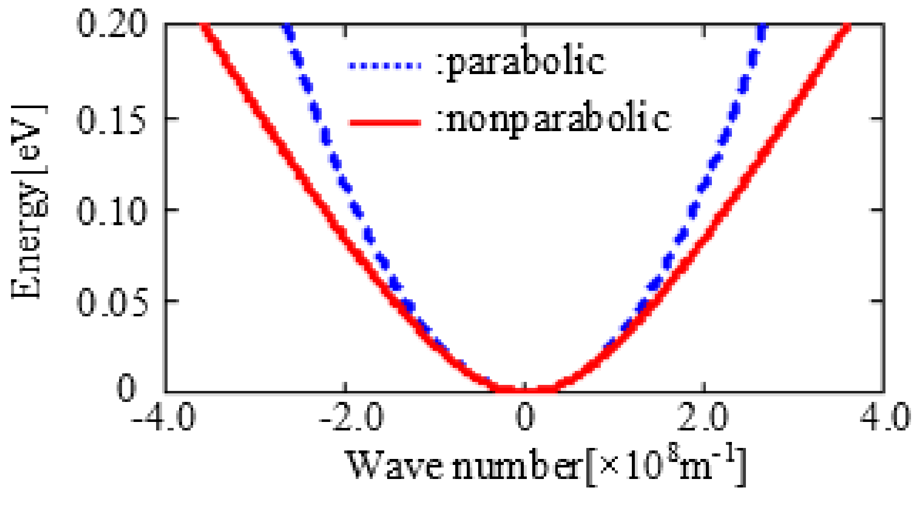

図 3－5　放物線性 *E-k* 分散関係と非放物線性 *E-k* 分散関係の模式図

表 3－2　nextnano3 にて設定したシミュレーションパラメータ

設定パラメータ	値
電子・ホールの量子モデル	1-バンドモデル 8-バンドモデル
電極の境界条件	オーミック
電子・ホールの材料間の境界条件	ノイマン
歪の計算	homogeneous-strain

バンドシミュレーションをする際、基本的に材料に関するパラメータは nextnano3 のデータベースを用いて行った。表 3－2 に、バンドシミュレーションをする上で、nextnano3 にて共通して設定したシミュレーションパラメータの一覧を示す。

3.3 スピン分離を考慮した電流密度の理論式導出

次にスピン分離を考慮した *J-V* 特性の理論式導出に関して述べる。

式(3-1)にスピン分離量 : $\varDelta$、式(3-2)にRashba効果の大きさを示すRashbaパラメータ : αの式を示す。先行研究[6]では、Rashba効果をRTD構造の内部電界による効果として扱っていた。しかし近年の研究からRashbaパラメータには電圧依存性があり、ヘテロ構造の界面でのバンド不連続により増大するSOIを考慮することが重要であると指摘されている。そのため本研究では、Rashba効果は量子井戸内の内部電界により生じる効果 : 内部電界項と両界面の電子密度の非対称性と急峻なバンド不連続により生じる効果 : 界面効果項の和として評価している[3]。

$$\varDelta(V, k_{\parallel}) = 2\alpha(V)k_{\parallel} \tag{3-1}$$

$$\begin{aligned}\alpha(V) = {} & \frac{\hbar^2 E_p}{6m_0} e_z \left(\frac{1}{(E(0)-E_{\mathrm{SO}})^2} - \frac{1}{(E(0)-E_{\mathrm{V}})^2} \right) \varepsilon_{qw}(V) \int |\Psi_z(z,V)|^2 dz \\ & + \frac{\hbar^2 E_p}{6m_0} e_z \sum_n \left[\frac{\varDelta E_{SO}}{2(E(0)-E_{SO}-\varDelta E_{SO})^2} + \frac{\varDelta E_{SO}}{2(E(0)-E_{SO})^2} \right. \\ & \left. - \frac{\varDelta E_V}{2(E(0)-E_V-\varDelta E_V)^2} - \frac{\varDelta E_V}{2(E(0)-E_V)^2} \right] s_n |\Psi_z(z_n,V)|^2 \end{aligned} \tag{3-2}$$

ただし、$k_{\parallel}$: 量子井戸面内方向の電子の波数、E_p : k・pインタラクラクションパラメータ、$E(0)$: 熱平衡状態での共鳴準位、E_{SO} : スプリットオフバンドエネルギー、E_{V} : 価電子帯エネルギー、$\varDelta E_{SO}$: スプリットオフバンドのバンド不連続量、$\varDelta E_V$: 価電子帯のバンド不連続量を示す。また図 3－6 に、電圧印加時の RTD のバンド図と井戸内の電子確率密度の模式図

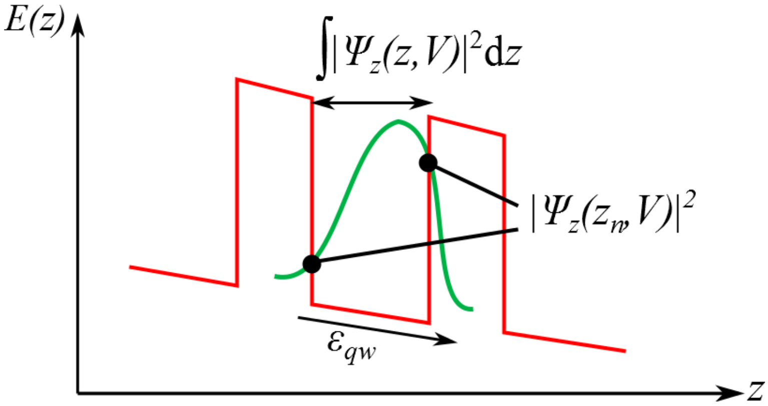

図 3－6　電圧印加時の RTD の伝導帯エネルギーと井戸内の電子確率密度の模式図

を示す。図 3－6 に示すように、ε_{qw}：量子井戸の内部電界、$|\Psi_z(z,V)|^2$：電圧 V における量子井戸内の電子確率密度、$|\Psi_z(z_n,V)|^2$: 量子井戸界面における電子確率密度を示している。$\mathrm{z_n}$は n 番目の界面の位置を示しており、$\mathrm{s_n}$は最も大きいz_nでは 1、それ以外の位置では-1 を示す。

RTD 構造での *J*-*V* 特性は、透過率を Voigt 関数によって表現して、計算することが可能である[11]。式(3-3)にスピン分離を考慮していない透過率の式を示す。

$$T_{\mathrm{Voigt}}\left(E_z, E(V); \Gamma_{\mathrm{L}}, \sigma\right) = \int_{-\infty}^{\infty} L(E-E', E_0; \Gamma_{\mathrm{L}}, \sigma) G(E', E_0; \sigma) \mathrm{d}E' \tag{3-3}$$

$$\cong T_{\mathrm{pseudo-Voigt}}(E_z, E(V); \Gamma_{\mathrm{L}}, \sigma) \tag{3-4}$$

$$= \xi L(E_z, E(V); \Gamma_{\mathrm{L}}) + (1-\xi) G(E_z, E(V); \sigma) \tag{3-5}$$

透過率は、$E_z = E(V)$でピーク値をもち、2 つの物理に起因した幅をもつ。1 つは量子井戸内の電子の散乱により生じる幅であり、ローレンツ関数によって表現される。もう 1 つは井戸界面のラフネスによって生じる幅であり、ガウス関数によって表現される。Γ_Lは規格化されたローレンツ関数の半値全幅を示す。σはガウス関数の標準偏差を示し、ガウス関数の半値全幅Γ_Gと比例関係にある。ξはローレンツ関数とガウス関数の合成比を示す。本研究では、量子井戸界面のラフネスは理想的なものとし、$\xi = 1$とした。また、スピン分離した up スピン(↑)、down スピン(↓)それぞれの共鳴準位は、

$$E_{\uparrow}(V, k_{\parallel}) = E(V) + \frac{\Delta}{2} = -\eta V + E(0) + \frac{\Delta(V, k_{\parallel})}{2} \tag{3-6}$$

$$E_{\downarrow}(V, k_{\parallel}) = E(V) - \frac{\Delta}{2} = -\eta V + E(0) - \frac{\Delta(V, k_{\parallel})}{2} \tag{3-7}$$

と表すことができるためスピン分離を考慮した透過率は、

$$T_{\mathrm{RTD}}(E_z, E(V, k_\parallel); \Gamma_\mathrm{L}, \sigma) \quad \cong T_{\mathrm{pseudo-Voigt}}(E_z, E(V, k_\parallel); \Gamma_\mathrm{L}) \tag{3-8}$$

$$= T_\uparrow(E_z, E_\uparrow(V, k_\parallel); \Gamma_L) + T_\downarrow(E_z, E_\downarrow(V, k_\parallel); \Gamma_L) \tag{3-9}$$

$$= L_\uparrow(E_z, E_\uparrow(V, k_\parallel); \Gamma_L) + L_\downarrow(E_z, E_\downarrow(V, k_\parallel); \Gamma_L) \tag{3-10}$$

$$= \frac{\Gamma_L}{2\pi} \frac{1}{\left(E_z - E_\uparrow(V, k_\parallel)\right)^2 + \left(\frac{\Gamma_L}{2}\right)^2} + \frac{\Gamma_L}{2\pi} \frac{1}{\left(E_z - E_\downarrow(V, k_\parallel)\right)^2 + \left(\frac{\Gamma_L}{2}\right)^2} \tag{3-11}$$

と表現することができる。RTD のトンネル電流は、バルク半導体中のドリフト電流

$$J = env \tag{3-12}$$

を元にして、表現することができる。RTD では、エミッタ‐量子井戸‐コレクタで 3D- 2D-3D と次元性が変化するトンネル輸送が生じ、エミッタ、コレクタの電子分布をフェルミ分布関数によって表される。式(3-12)より、eは電子が持つ電荷量、n は透過する電子密度、vはトンネル方向の電子の運動速度に値する。またエミッタに供給された電子がすべて電流に寄与するのではなく、エミッタとコレクタの電子分布の差分が電流に寄与し、さらにトンネル現象により電子が流れるため、透過する電子密度 n は、エミッタとコレクタの電子分布の差分と透過率の積により表現することができる。そのため、トンネル電流密度は波数空間の積分を用いて、

$$J_{tunneling}(V) = \frac{e}{(2\pi)^3} \iint v_z(f_L - f_R) T_{\mathrm{RTD}}(E_z, E(V, k_\parallel); \Gamma_\mathrm{L}, \sigma)\, dk_z dk_\parallel^2 \tag{3-13}$$

と表現することができる。しかし、フェルミ分布関数はエネルギーの関数で表現されるため、エネルギー積分に変数変換する必要がある。変数変換をする際、*E*-*k* 分散関係を考慮する必要がある。

放物線性な *E*-*k* 分散関係の場合

一般的に E-k 分散関係は、式(3-14)のように放物線近似によって表される。

$$E = E_\parallel + E_z = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_\parallel^2 + k_z^2) \tag{3-14}$$

式(3-14)より、トンネル方向と面内方向のエネルギーで変数分離することができきため、

$$v_z = \frac{1}{\hbar}\frac{dE_z}{dk_z} \tag{3-15}$$

$$dk_{\parallel}^2 = 2\pi k_{\parallel} dk_{\parallel} \tag{3-16}$$

$$dk_{\parallel} = \frac{m_{\parallel}}{\hbar^2 k_{\parallel}} dE_{\parallel} \tag{3-17}$$

となる関係を用いて、式(3-13)をエネルギー積分に置き換えると、

$$J_{tunneling}(V) = \frac{e}{4\pi^2\hbar^3}\int_0^{\infty}\int_{E_c}^{\infty}(f_L - f_R)T_{RTD}(E_z, E_{\parallel}, V; \Gamma_L)dE_{\parallel}dE_z \tag{3-16}$$

となる。よって、スピン分離を考慮したトンネル電流密度は、

$$\begin{aligned} J_{tunneling}(V) \quad &= J_{\uparrow}(V) + J_{\downarrow}(V) \\ &= \frac{e}{4\pi^2\hbar^3}\int_0^{\infty}\int_{E_c}^{\infty}(f_L - f_R)T_{\uparrow}(E_z, E_{\parallel}, V; \Gamma_L)dE_{\parallel}dE_z \\ &\quad + \frac{e}{4\pi^2\hbar^3}\int_0^{\infty}\int_{E_c}^{\infty}(f_L - f_R)T_{\downarrow}(E_z, E_{\parallel}, V; \Gamma_L)dE_{\parallel}dE_z \end{aligned} \tag{3-17}$$

と導出される。

<u>非放物線性な *E*-*k* 分散関係の場合</u>

非放物線成分を考慮した *E*-*k* 分散関係では、一般的に式(3-18)のように表される。

$$E(1 + a_{non}E) = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_{\parallel}^2 + k_z^2) \tag{3-18}$$

ただし、a_{non}は *E*-*k* 分散の非放物線パラメータを示す。本研究では、全体エネルギーE を$k_{\parallel}$の関数である$E_{\parallel}$とk_zの関数であるE_zの和とした。そのため式(3-18)は、

$$(E_{\parallel} + E_z)\left(1 + a_{non}(E_{\parallel} + E_z)\right) = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(k_{\parallel}^2 + k_z^2\right) \tag{3-19}$$

と表すことができる。非放物線成分を考慮することで単純にエネルギーと波数を変数分離することはできなくなっている。そのためまず、スピン分離量の計算に用いる$k_{\parallel}$の大きさ$|k_{\parallel}|$に関して、$k_{\parallel} = 0$のとき$E_{\parallel} = 0$、$k_z = 0$のとき$E_z = 0$と仮定し、

$$\left|k_{\parallel}\right|^2 = |k_T|^2 - |k_z|^2(k_{\parallel} = 0) \tag{3-20}$$

と定義した。よって$|k_{\parallel}|$は、

$$\left|k_{\parallel}\right|^2 \quad = \frac{2\mathrm{m}^*}{\hbar^2}(E_{\parallel} + E_z)\left(1 + a_{non}(E_{\parallel} + E_z)\right) - \frac{2\mathrm{m}^*}{\hbar^2}E_z(1 + a_{non}E_z) \tag{3-21}$$

$$=\frac{2\mathrm{m}^*}{\hbar^2}E_{\parallel}\left(1+a_{non}(E_{\parallel}+2E_z)\right) \tag{3-22}$$

と表すことができる。

また、E の$k_{\parallel}$による一階偏微分とk_zによる一階偏微分は、式(3-19)より、

$$\frac{\partial E_{\parallel}}{\partial k_{\parallel}}\left(1+2a_{non}(E_{\parallel}+E_z)\right)=\frac{\hbar^2}{m^*}k_{\parallel} \tag{3-23}$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial k_z}\left(1+2a_{non}(E_{\parallel}+E_z)\right)=\frac{\hbar^2}{m^*}k_z \tag{3-24}$$

と表すことができるため、式(3-13)をエネルギー積分に置き換えると、

$$J_{tunneling}(V)=\frac{e}{4\pi^2\hbar^3}\int_0^{\infty}\int_{E_c}^{\infty}(1+2a_{non}(E_{\parallel}+E_z))(f_L-f_R)T_{RTD}(E_z,E_{\parallel},V;\Gamma_L)dE_{\parallel}dE_z \tag{3-25}$$

となる。よって、スピン分離を考慮したトンネル電流密度は、

$$\begin{aligned}J_{tunneling}(V)\quad &= J_{\uparrow}(V)+J_{\downarrow}(V)\\ &=\frac{e}{4\pi^2\hbar^3}\int_0^{\infty}\int_{E_c}^{\infty}(1+2a_{non}(E_{\parallel}+E_z))(f_L-f_R)T_{\uparrow}(E_z,E_{\parallel},V;\Gamma_L)dE_{\parallel}dE_z \\ &\quad+\frac{e}{4\pi^2\hbar^3}\int_0^{\infty}\int_{E_c}^{\infty}(1+2a_{non}(E_{\parallel}+E_z))(f_L-f_R)T_{\uparrow}(E_z,E_{\parallel},V;\Gamma_L)dE_{\parallel}dE_z\end{aligned} \tag{3-26}$$

と表される。また、熱電子放出成分は、

$$J_{thrmionic}(V)=J_0\left\{\exp\left(\frac{eV}{nk_BT}\right)-1\right\} \tag{3-27}$$

として、InSb 系 RTD の *J-V* 特性の実験値[9]からフィッティングし、77K において$J_0=1200\mathrm{A/cm^2}$、$n=25$とした。

本研究では、式(3-17),式(3-26)に示すトンネル電流と式(3-27)に示す熱電子放出成分の和によって、スピン分離を考慮した *J-V* 特性を計算した。

$$J_{total}(V)=J_{tunneling}(V)+J_{thermionic}(V) \tag{3-28}$$

表 3－3 に、電流密度計算の中で共通して用いたパラメータの一覧を示す。

図 3－7 に、スピン分離を考慮していない *J-V* 特性とスピン分離を考慮した *J-V* 特性の計算例を示す。スピン分離を考慮していない場合、トンネル効果により 1 つの凸をもつ *J-V* 特性を得ることができる。このとき電流密度がピーク値となるときの電圧をV_{peak}とした。また、理想的なスピン分離を得られた場合、up スピンと down スピンのエネルギー的分離にから 2 つの凸をもつ *J-V* 特性をえることができる。

表 3−3　電流密度計算の中で共通して用いたパラメータ

物理パラメータ		値
ディラック定数	$\hbar$	1.05×10^{-34}[Js]
素電荷量	e	1.6×10^{-19}[c]
自由電子の質量	$\mathrm{m_0}$	9.1×10^{-31}[kg]
有効質量比	m^*/m_0	0.0135
k・pインタラクションパラメータ	$\mathrm{E_p}$	23.3
E-*k* 分散の非放物線パラメータ	α_{non}	4.1[eV^{-1}]

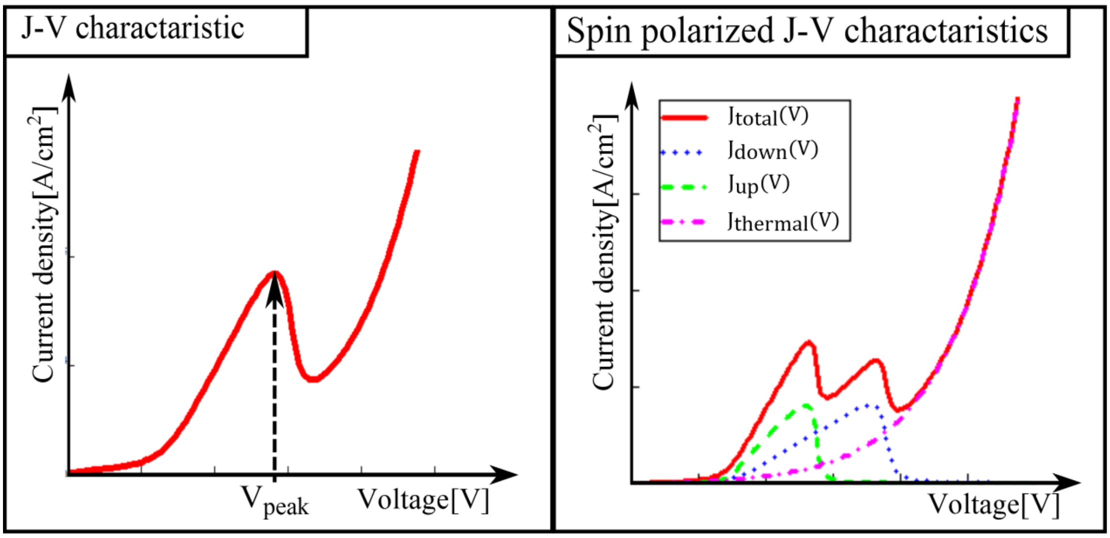

図 3−7　スピン分離を考慮していない *J*-*V* 特性とスピン分離を考慮した *J*-*V* 特性の計算例

第四章

―スピン分離観察のための RTD 構造の検討―

4.1　はじめに

RTD を用いて *J-V* 特性からスピン分離観察をするにあたり、RTD における SOI の構造依存性が未解明であった。本研究では、3 章で提案したシミュレーションプロセスを用いて、RTD における SOI の構造依存性を検討し、その中から大きな SOI を示す RTD 構造を用いて J-V 特性を計算し、スピン分離観察が可能かどうか評価した。RTD モデルには一般的な構造である対称構造と量子井戸層に AlInSb を挿入した非対称構造の 2 種類を用いて検討した。また、*dJ-dV* 特性からスピン分離量を簡易的に評価するための理論式を導出した。

本章では、上記に関する解析結果について述べる。ただし、すべての検討において温度は 77K とした。

4.2　対称構造

最初に、図 4－1 に示すような対称構造においてスピン分離観察が可能な RTD 構造について検討した。SOI の構造依存性を明らかにし、*J-V* 特性の共鳴準位幅：Γ 依存性からスピン分離観察について検討した。表 4－1 に対称構造に関する検討をする際に、バンドシミュレーションにて用いた構造パラメータ、およびシミュレーションパラメータを示す。

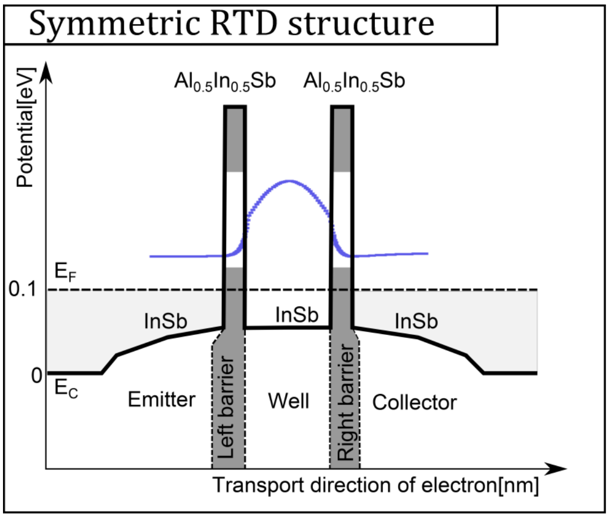

図 4－1　対称 RTD 構造のバンド図

表 4－1　対称構造に関する検討において用いた構造パラメータ

設定パラメータ		値
積層構造におけるそれぞれの膜厚		
電極		11[nm]
電子供給層	n^{+}-InSb 層	440[nm]
スペーサー層	n^{-}-InSb 層	55[nm]
	i-InSb 層	5.5[nm]
バリア層	$Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ 層	2.2[nm]
量子井戸層	i-InSb 層	6.7～25[nm]
ドーピング濃度	n^{+}-InSb 層	$2 \times 10^{18}[\mathrm{cm}^{-3}]$
	n^{-}-InSb 層	$2 \times 10^{16}[\mathrm{cm}^{-3}]$
ドナー準位		-0.091[eV]
温度		77[K]
印加電圧		0～1.0[V]

4.2.1　SOI の構造依存性

対称構造における SOI の構造依存性は、井戸幅について検討した。バリア幅は、薄すぎてしまうと量子井戸の電子の閉じ込め効果が弱くなり、厚すぎてしまうと材料間の格子不整合より欠陥が生じてしまう。最適なバリア幅の設計が求められる。それを踏まえた上で、先行研究[10]より、最もピーク-バレー比が大きいバリア幅を採用し、バリア幅 = 2.2nm とした。図 4－2 に、ピーク電圧印加時の SOI の井戸幅依存性を示す。図 4－2 より、井戸幅が狭い構造ほど内部電界項が大きくなり、界面効果項が小さくなる。井戸幅が広い構造ほど内部電界項が小さくなり、界面効果項が大きくなった。結果的に、全体の SOI は井戸幅に寄らずほとんど一定の値となることが明らかになった。この結果より、井戸幅が狭い構造では、内部電界が大きいため内部電界項は大きいが、基底準位が高いことで井戸の傾きの影響を受けにくくなるため、井戸内の波動関数の片寄りが小さく、界面効果項が小さくなったと考えた。また、井戸幅が広い構造では、基底準位が低いため、井戸幅が狭い構造の場合と反対に、井戸内の波動関数の片寄りが大きく、内部電界が小さくなったと考えた。

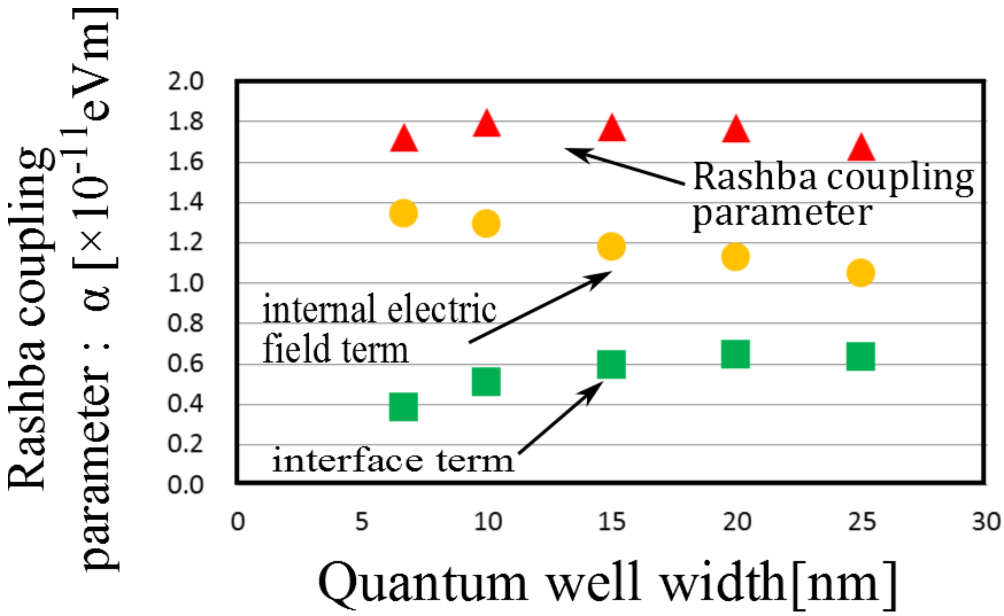

図 4－2　対称構造での SOI の構造依存性

4.2.2　*J-V* 特性からのスピン分離評価

対称構造における代表的な構造として井戸幅 ＝ 15nm での *J-V* 特性を計算した。図 4－3 に、井戸幅 15nm の構造における *J-V* 特性と *dJ/dV-V* 特性の Γ 依存性を示す。スピン分離観察を行う上で *J-V* 特性と、さらに明確な電流密度の電圧変化による変化を見るために *dJ/dV-V* 特性を用いて検討した。*J-V* 特性において 2 つの凸が見えないほどのスピン分離量でも、スピン分離による段階的な変化を、*dJ/dV-V* 特性によって、2 つの凸として観察することができる。Γ 依存性では、先行研究[6]において、実測された InSb 系 RTD の *J-V* 特性[10]をフィッティングし、得られた Γ=5~15meV を中心に検討した。その結果、*J-V* 特性からではスピン分離量が十分大きくないため、2 つの凸は見られず、スピン分離観察は困難であることを示した。また、*dJ/dV-V* 特性では、Γ=5meV のときにスピン分離によるを用いて検討した。

Γ=5meV のときにしか 2 つの凸を観察することができないため、対称 RTD 構造ではスピン分離観察は困難であることを示唆した。

対称 RTD 構造では、内部電界項に比べ界面効果項が小さいことが課題であった。そのため界面効果項を大きくすることができる構造の提案を目指した。

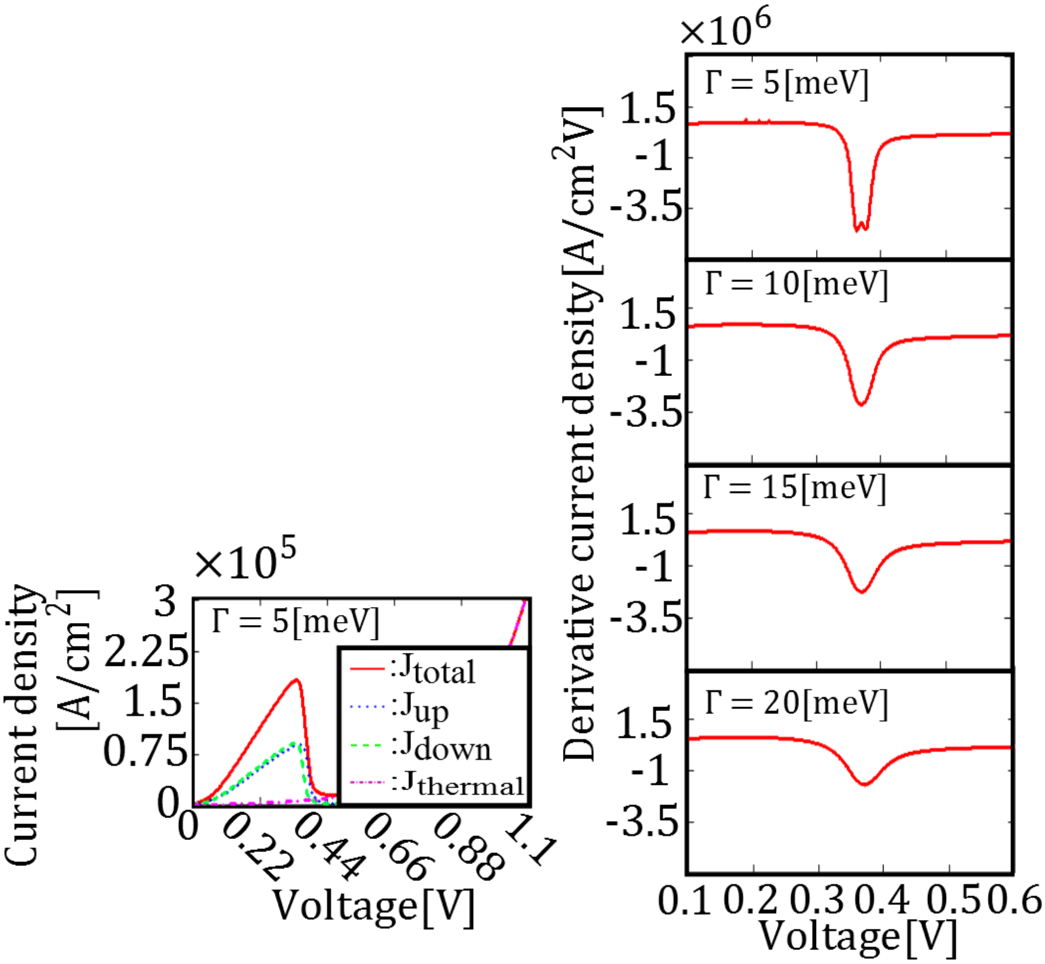

図 4－3　井戸幅 15nm 構造における *J-V* 特性と *dJ-dVV* 特性の Γ 依存性

<u>4.3　非対称構造</u>

次に、対称構造よりも SOI を大きくするために、図 4－4 に示すような、量子井戸内に step 層として AlInSb を挿入した非対称構造について検討した。構造の非対称性より、量子井戸内の波動関数が片寄ることで、熱平衡状態で界面効果が発現し、SOI が大きくなると考えられる。対称構造と同様に、SOI の構造依存性を明らかにし、SOI が大きくなる構造を用いて *J-V* 特性を計算し、スピン分離観察について検討した。表 4－2 に非対称構造に関する検討をする際に、バンドシミュレーションにて用いた構造パラメータ、およびシミュレーションパラメータを示す。

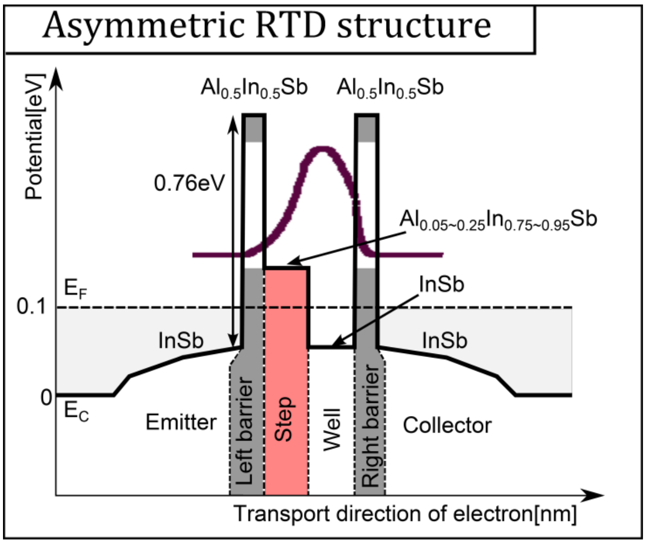

図 4－4　非対称 RTD 構造のバンド図

表 4－2　非対称構造に関する検討において用いた構造パラメータ

設定パラメータ		値
積層構造におけるそれぞれの膜厚		
電極		11[nm]
電子供給層	n^{+}-InSb 層	440[nm]
スペーサー層	n^{-}-InSb 層	55[nm]
	i-InSb 層	5.5[nm]
バリア層	$Al_{0.5}In_{0.5}Sb$ 層	2.2[nm]
Step 層/量子井戸層	$Al_{0.05\sim0.25}In_{0.75\sim0.95}Sb$ 層	20~80[%]
量子井戸層	i-InSb 層	6.7～25[nm]
ドーピング濃度	n^{+}-InSb 層	$2\times10^{18}[\mathrm{cm}^{-3}]$
	n^{-}-InSb 層	$2\times10^{16}[\mathrm{cm}^{-3}]$
ドナー準位		-0.091[eV]
温度		77[K]
印加電圧		0～1.0[V]

4.3.1　SOI の構造依存性

非対称構造では、α の井戸幅と step 幅、高さの依存性について検討した。井戸幅は 4.7nm～25nm、step 幅/井戸幅比を 20%～80%、step 高さは 0.025eV～0.3eV までとした。検討していくにあたり、$\alpha(V)$は V に対して線形に増加し、かつ、より $\alpha(0)$が大きい構造ではより大きなスピン分離を得られることを確認した。そのため以後、α の構造依存性を検討する際に

は、シミュレーション時間の短縮のために、$\alpha(0)$を用いて検討をした。

まず α への step 幅の影響を検討するために、井戸幅=15nm、step 高さ=0.05eV として 0V での α：$\alpha(0)$の step 幅依存性について検討した。$\alpha(0)$の step 幅依存性の結果を図 4－5 に示す。その結果、step 幅/井戸幅比=50-60%のとき最も SOI が大きくなることが分かった。この結果から、井戸幅に対して、step 幅が狭すぎたり広すぎたりしてしまうと、単一量子井戸のようになり非対称性の影響が小さくなってしまうと考えた。そのため以後 step 幅に関して、step 幅/井戸幅比=50%とした。

次に、SOI の井戸幅、step 高さ依存性について検討した。図 4－6 に$\alpha(0)$の井戸幅、step 高さ依存性を示す

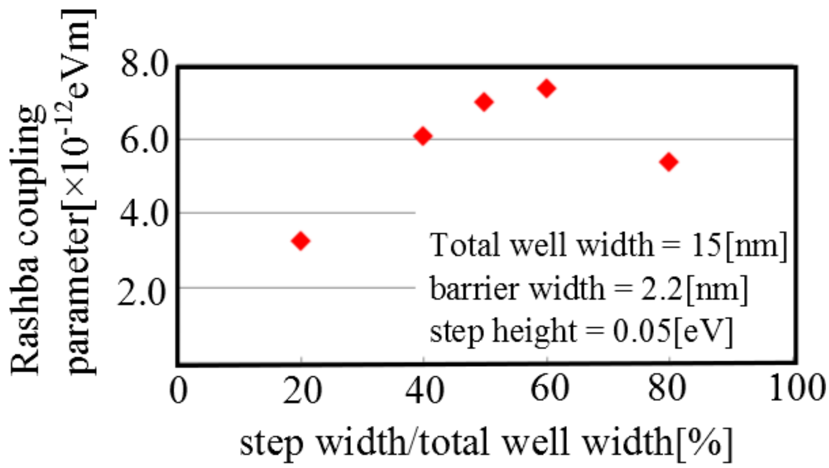

図 4－5　$\alpha(V_{peak})$の step 幅依存性

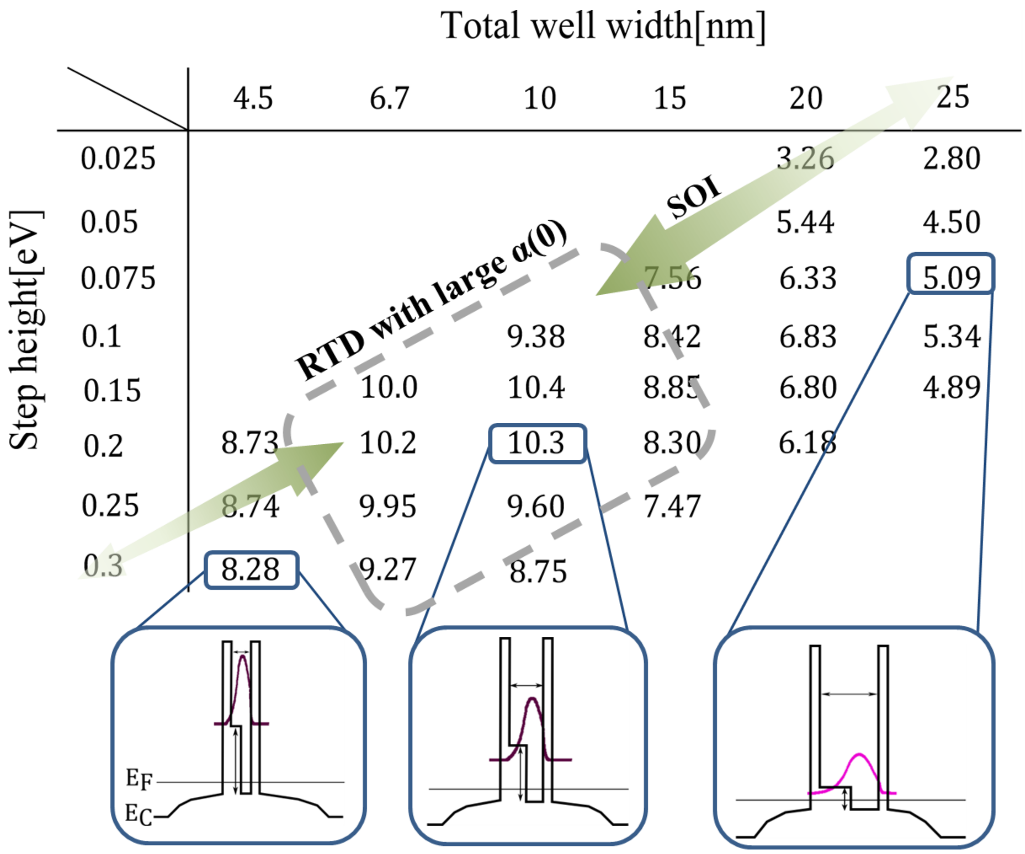

図 4－6　$\alpha(0)[\times 10^{-12}\mathrm{eVm}]$の井戸幅、step 高さ依存性

図 4－6 より、井戸幅=6.7～15nm、ステップ高さ=0.1～0.3eV の特定の構造パラメータ範囲内で、$\alpha(0)$が大きくなることが分かった。これは、図 4－6 の中で右上の構造のように、基底準位が step より低くすぎてしまうと step の影響を受けず、電子確率密度の片寄りが小さくなってしまい$\alpha(0)$が小さくなる。また、左下の構造に向かうにつれて、電子確率密度の片寄りは大きくなり、$\alpha(0)$も大きくなる。しかし、基底準位が step よりも高すぎてしまうと、再び電子確率密度の片寄りが小さくなり$\alpha(0)$も小さくなると考えた。そのため、この結果より$\alpha(0)$の井戸幅、step 高さ依存性には、量子井戸内の電子確率密度の片寄りと基底準位の間にトレードオフ関係があることで、特定の構造パラメータ範囲内で$\alpha(0)$が大きくなるのだと示唆した。

SOI への歪の影響

次に、本研究で用いている系は格子不整合系であるため、SOI への歪の影響について検討した。図 4－7 に歪を考慮した$\alpha(0)$の井戸幅、step 高さ依存性を示す。図 4－7 より、歪を考慮した$\alpha(0)$ の井戸幅、step 高さ依存性は、歪を考慮していない場合と比較して、全体的に大きさが小さくなるが、構造ごとの$\alpha(0)$の大小関係は変化しないことが分かった。これは、歪を考慮することで、電子確率密度の分布に変化はない。しかし、AlInSb のバンドギャッ

プは狭まり、step の影響が小さくなったことで両井戸界面での電子確率密度の片寄り度合が小さくなったことに起因していることが分かった。

次に歪を考慮した対称構造・非対称構造におけるV_{peak}印加時の α:$\alpha(V_{peak})$の比較をし、図 4−8 にその結果を示す。図 4−8 に示されるように、非対称構造の中で大きな$\alpha(0)$を持つ構造の$\alpha(V_{peak})$は対称構造と比較して、1.3〜1.5 倍大きくなり、内訳を見ると、内部電界項はほとんど変わらず、構造の非対称性により界面効果項が大きくなっていることが分かった。以降、歪を考慮して検討を行った。

Step height with strain[eV] \ Total well width[nm]	4.5	6.7	10	15	20	25
0.019					2.95	2.58
0.041					4.97	4.25
0.058				6.77	5.93	5.96
0.077			8.34	7.71	6.37	5.22
0.116		8.80	9.12	8.24	6.61	
0.154	7.44	9.16	9.28	7.90	6.09	
0.194	7.36	8.83	9.16	7.05		
0.231	7.12	8.12	7.94			

RTD with large α(0)

SOI

図 4−7 歪を考慮した$\alpha(0)[\times 10^{-12}\mathrm{eVm}]$の井戸幅、step 高さ依存性

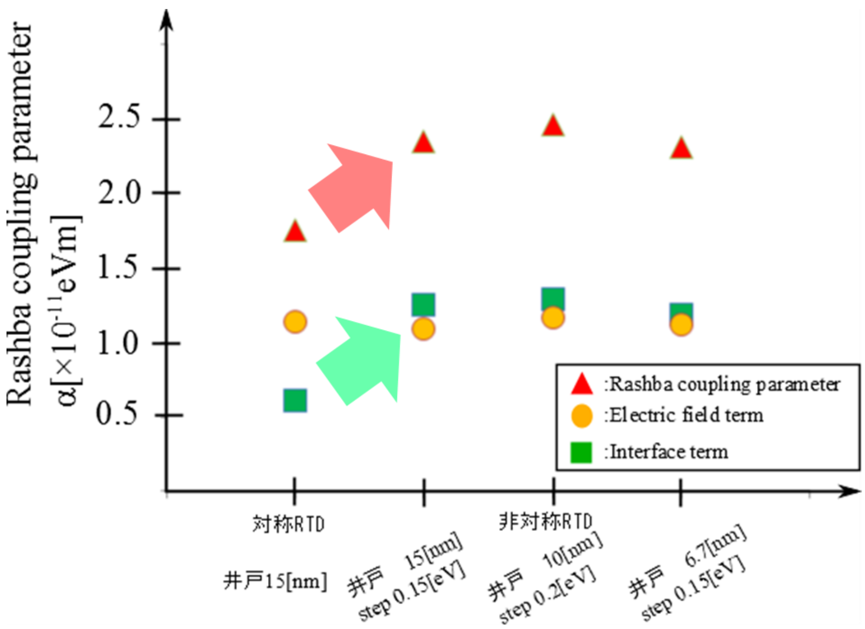

図 4−8 対称/非対称 RTD 構造における$\alpha(V_{peak})$の比較

4.3.2　*J-V* 特性からのスピン分離評価

よりα(0)が大きいことでよりスピン分離量が大きくなることを踏まえ、大きなα(0)をもつ代表的な構造(井戸幅=10nm, step 高さ=0.154eV)を用いて、*J-V* 特性と *dJ-dV* 特性の Γ 依存性を計算し、その結果を図 4−9 に示す。図 4−9 より、Γ=5meV であればスピン分離観察は可能だが、Γ=10meV 以上になってしまうとスピン分離による変化が見られなくなってしまうことが分かった。そのため、歪を考慮した非対称構造を用いた場合、SOI は特定の構造パラメータ範囲内で大きくなり対称構造に比べ 1.3〜1.5 倍大きくなるが、*J-V* 特性、*dJ-dV* 特性からのスピン分離観察は困難であることを示唆した。

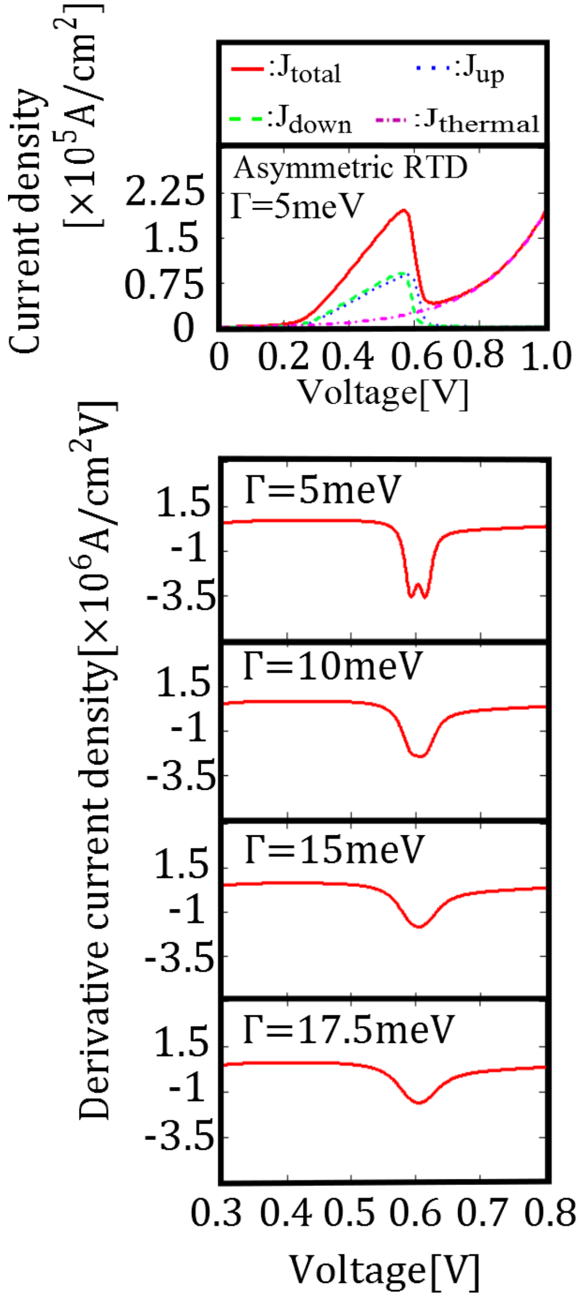

図 4−9　非対称構造における *J-V* 特性と *dJ-dV* 特性の Γ 依存性

***dJ-dV* 特性への電子供給層のフェルミ準位の影響**

次に *dJ-dV* 特性における電子供給層のフェルミ準位依存性について検討した。スピン分離量は面内方向の波数に依存しており、フェルミ準位を高くすることで電流に寄与する波数が大きくなるため、より大きなスピン分離量を期待することができる。まず、InSb へのドーピング濃度の変化に対するフェルミ準位の温度依存性を図 4－10 に示す。図 4－10 より、$10^{15}\mathrm{cm}^{-3}$オーダーから$10^{18}\mathrm{cm}^{-3}$オーダーまでの n 型ドーピング濃度の変化による伝導体のフェルミ準位の変化と$10^{15}\mathrm{cm}^{-3}$オーダーから$10^{19}\mathrm{cm}^{-3}$オーダーまでの p 型ドーピング濃度の変化による価電子帯のフェルミ準位の変化が判明している。そのためこれまでの検討では、エミッタ、コレクタへの$2\times10^{18}\mathrm{cm}^{-3}$の n 型ドーピングによる、$E_F=0.1\mathrm{eV}$を想定し進めていた[12]。そこで、$10^{18}\mathrm{cm}^{-3}$以上のオーダーでのドーピングを想定し、より高いフェルミ準位でのシミュレーションを試みた。しかし、InSb へ$10^{19}\mathrm{cm}^{-3}$オーダーの n 型ドーピングをすることは可能であるが、そのときのフェルミ準位の実験値は発見することができなかった。そのため今回、10^{19}オーダーのドーピングを仮定し、$E_F=0.15, 0.2\mathrm{eV}$での *J-V* 特性の Γ 依存性について検討し、その結果を図 4－11 に示す。図 4－11 に示すように、E_Fを 0.15eV まで高くすることができれば、スピン分離量が大きくなり、Γ が 15meV まで広くなった場合でもスピン分離による特徴的な変化を確認することができるため、既報告[10]の InSb 系 RTD を想定した場合、スピン分離観察が可能であること示唆した。

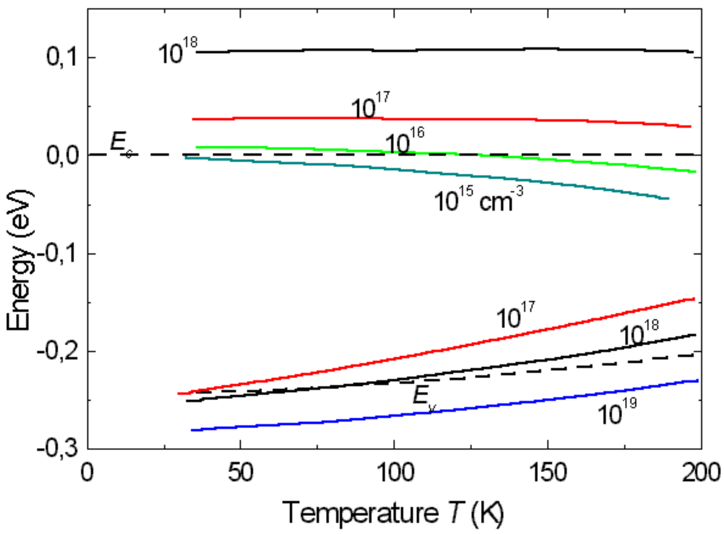

図 4－10　InSb へのドーピング濃度の変化に対するフェルミ準位の温度依存性[12]

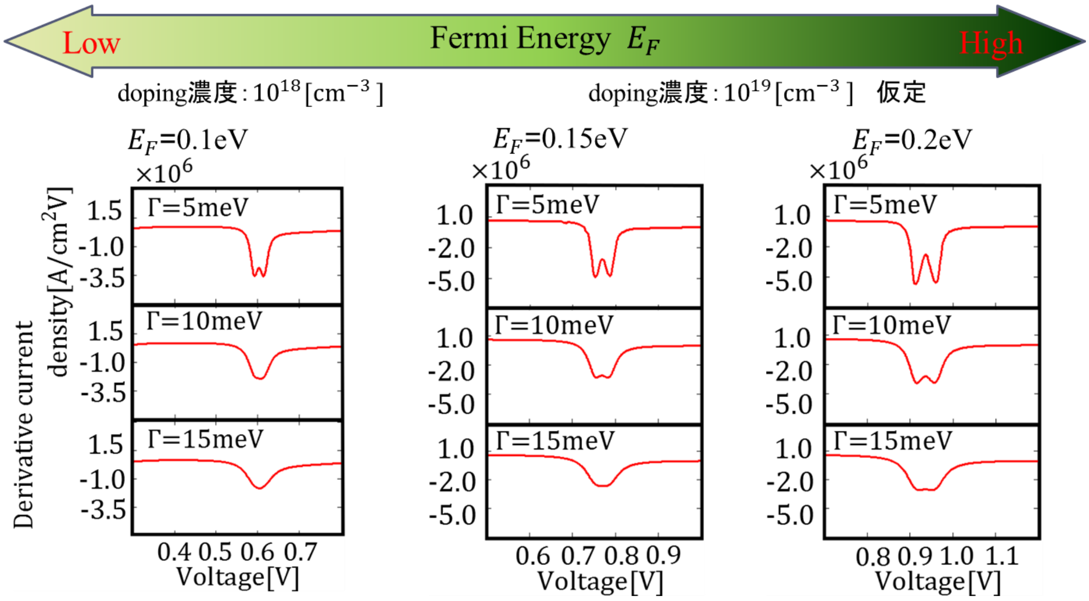

図 4－11　非対称構造における *dJ/dV-V* 特性のE_f依存性

ここまでの検討から、本研究において、最も大きな$\alpha(V_{peak})$をもつ井戸幅=10nm, $Al_xIn_{1\text{-}x}Sb$の組成比 *x*=0.146(歪を考慮した step 高さ=0.154eV)、バリア幅=2.2nm の非対称 RTD 構造をスピン分離観察のための最適構造とした。またスピン分離観察する上で、E_Fが0.1eVのときΓは5meV以下であること、E_Fが0.15eV以上のときΓは15meV 以下であることを必要条件であることを示した。

非放物線成分を考慮した *E-k* 分散関係の影響

次に、より厳密なシミュレーションをするために、*E-k* 分散に非放物線成分を考慮し、*J-V* 特性からスピン分離観察が可能かどうか検討した。対象構造は、前節で示した最適構造(井戸幅=10nm、step 高さ=0.154eV)を用いて、E_Fは 0.15eV とした。*E-k* 分散に非放物線成分を考慮することで、有効質量が変化し、共鳴準位が低くなり、波動関数分布が変化することが予測される。ここでは、量子井戸内の電子確率密度分布、$\alpha(\alpha(0), \alpha(V_{peak}))$、スピン分離観察への影響について述べる。

まず、バンドシミュレーションによる量子井戸内の電子確率密度分布への影響について検討した。図 4－12 に、検討に用いた構造のバンド図と電子確率密度の計算結果を示す。*E-k* 分散の非放物線成分を考慮するために、3.2.2 節に示す 8－バンドモデル、計算条件を用いて計算を行った。基底準位は、放物線近似のときの値とほとんど変わらず、第二準位以降が大きく下がっていた。この結果は 3.2.2 節で示した単純な量子井戸構造の結果、及び他の研究グループの実験結果[9]と一致する。また、*E-k* 分散の非放物線成分を考慮したことで、量子井戸内の電子確率密度は、より顕著に InSb 側に片寄った分布を示した。この結果は、有効質量の増加に伴い、井戸の閉じ込めが強まったことで波動関数の滲み出しが小さくな

ったことに起因していると考えた。

次に、放物線性 *E*-*k* 分散と非放物線性 *E*-*k* 分散における *α*-*V* 特性の比較をし、その結果を図 4－13 に示す。図 4－13 より、*E*-*k* 分散に非放物線成分を考慮することで、*α* は減少しており、その中でも界面効果項が減少していることが分かった。界面効果項の減少は、波動関数の量子井戸からの滲み出しの減少により、両界面での電子確率密度の片寄りが小さくなったことが原因だと考えられる。また、*α* が小さくなったことで *J*-*V* 特性からのスピン分離評価を難化させる方向への変化となることが分かった。

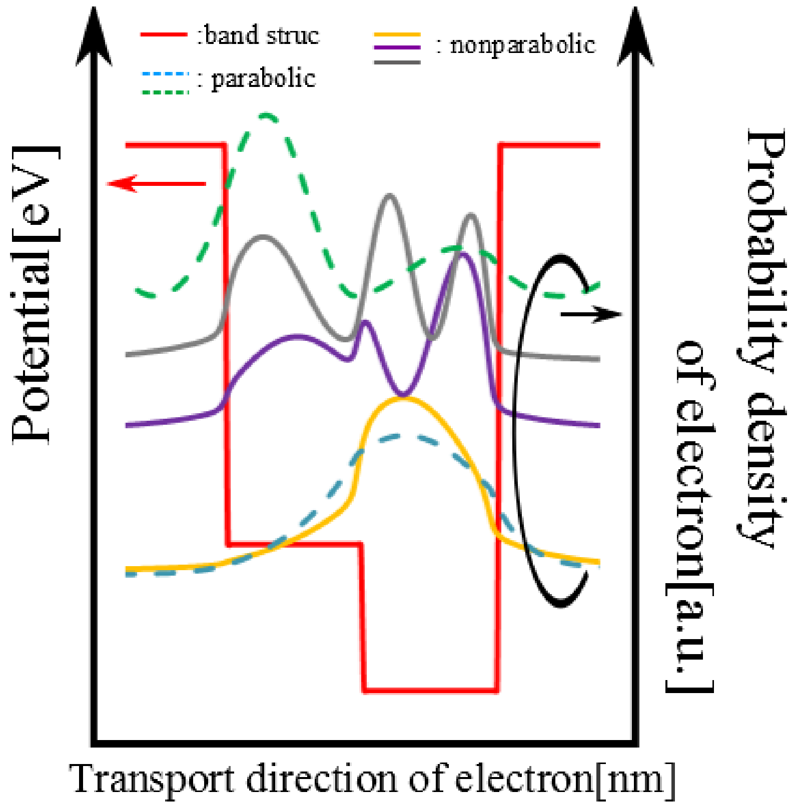

図 4－12　放物線性/非放物線性 *E*-*k* 分散における電子確率密度の比較

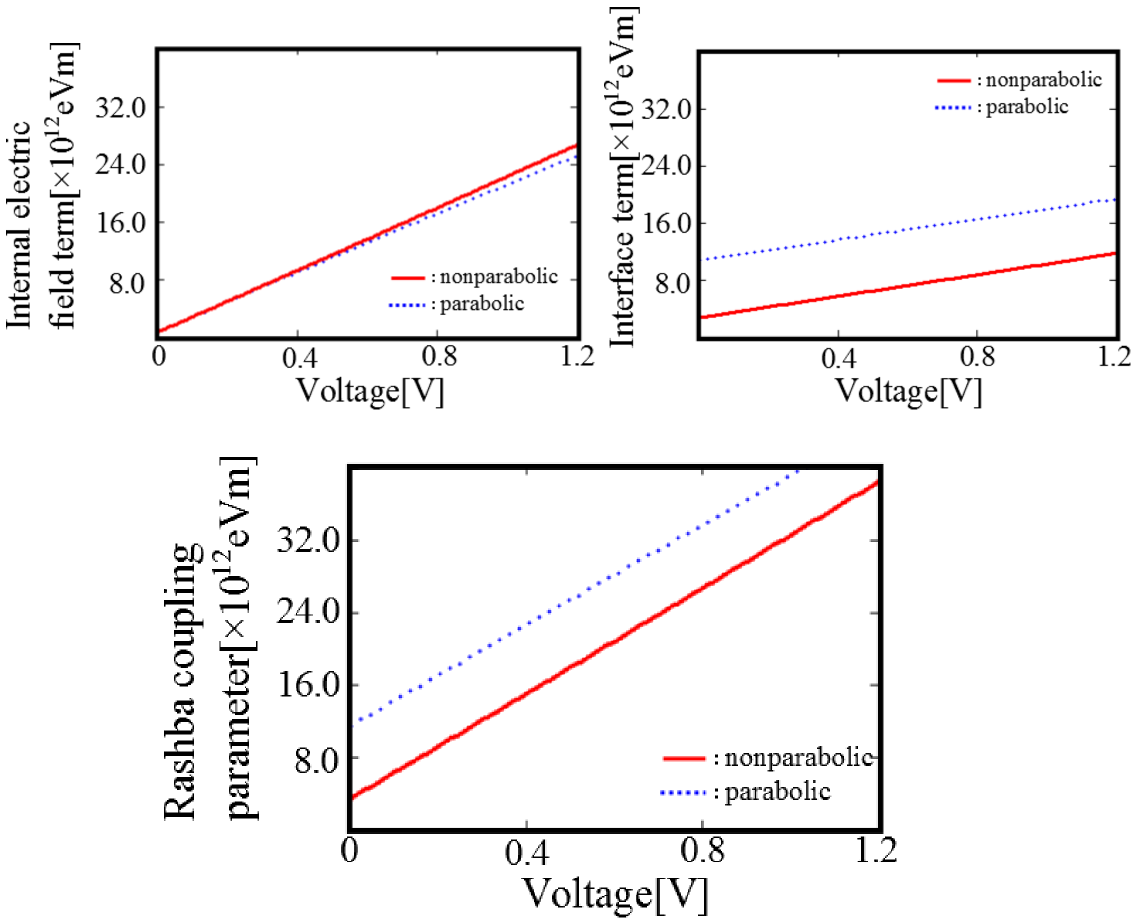

図 4－13　放物線性/非放物線性 E-k 分散における α-V 特性の比較

次に、放物線性 E-k 分散と非放物線性 E-k 分散における J-V 特性の Γ 依存性を比較し、スピン分離観察への影響について検討した。その結果を図 4－14 に示す。E-k 分散に非放物線成分を考慮したことで α が小さくなったが、J-V 特性では Γ=15meV のときでもスピン分離による特徴的な変化を確認することができるため、非放物線成分の影響は小さく、スピン分離観察は可能であることを示唆した。これは、α は小さくなったが、非放物線成分を考慮したことで 3.2.2 節に示すように電流に寄与する波数が大きくなったことで、スピン分離量はほとんど変化しなかったと考えられる。

以上の検討より、最適構造(井戸幅=10nm, 組成比=0.146(歪を考慮した step 高さ=0.154eV)、バリア幅=2.2nm)を用いた場合、E_f を高くすることで、スピン分離観察を難化させる物理(歪、非放物線性 E-k 分散)を考慮しても、既報告[9]にある InSb 系 RTD を想定した場合に J-V 特性からスピン分離観察は可能であることを示唆した。

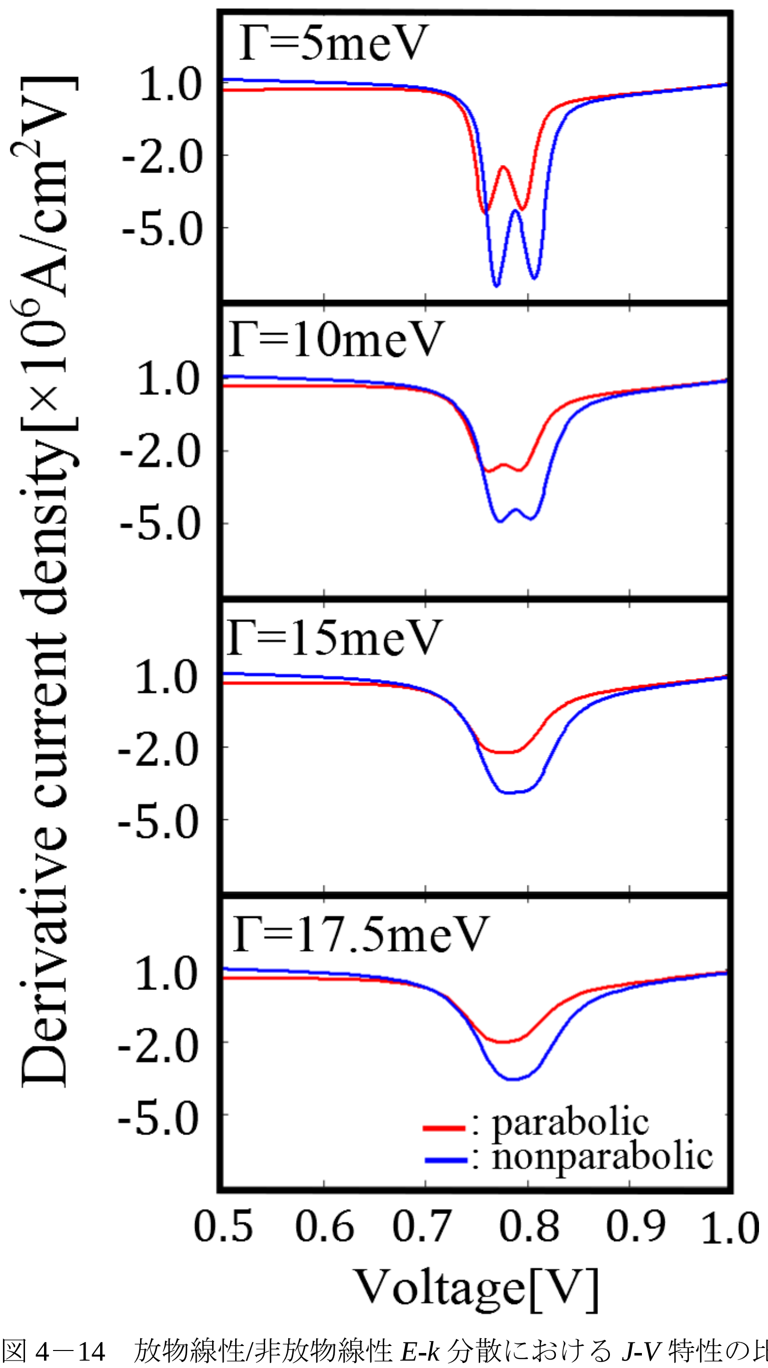

図 4－14　放物線性/非放物線性 *E*-*k* 分散における *J*-*V* 特性の比較

4.4 *dJ/dV-V* 特性からスピン分離量評価のための理論式の導出

次に、*dJ/dV-V* 特性から 2 つの凸を観察できた場合にスピン分離量を定量的に評価するための手法として、*dJ/dV-V* 特性における 2 つの凸のピーク間隔 $\varDelta V$ とスピン分離量 $\varDelta$ の関係式を求めた。導出過程について述べる。

まず、up スピンと down スピンの共鳴準位を式(4-1),(4-2)に示す。

$$E_{\uparrow}(V,k_{\parallel}) = E(V) + \frac{\varDelta}{2} = -\eta V + E(0) + \frac{\varDelta(V,k_{\parallel})}{2} \tag{4-1}$$

$$E_{\downarrow}(V,k_{\parallel}) = E(V) - \frac{\varDelta}{2} = -\eta V + E(0) - \frac{\varDelta(V,k_{\parallel})}{2} \tag{4-2}$$

dJ/dV-V 特性における下に凸のピークは、電流密度の減少率が最も大きいことを示す。また、エミッタの電子分布はフェルミ分布関数により表されており、伝導帯エッジに近づくにつれて、電流に寄与する電子数が多くなるため、伝導帯エッジよりも共鳴準位が下回ったとき最も電流密度が減少する。そのため、*dJ/dV* が下に凸のピーク時の印加電圧は、伝導帯エッジを共鳴準位のピークが下回るときの電圧に相当する。このとき、up スピンの電圧を $V_{\uparrow peak}$、down スピンの電圧を $V_{\downarrow peak}$($V_{\uparrow peak} > V_{\downarrow peak}$)とすると、それぞれの共鳴準位は、

$$E_{\uparrow}\left(V_{\uparrow peak},k_{\parallel}\right) = -\eta V_{\uparrow peak} + E(0) + \frac{\varDelta(V_{\uparrow peak},k_{\parallel})}{2} \tag{4-3}$$

$$E_{\downarrow}\left(V_{\downarrow peak},k_{\parallel}\right) = -\eta V_{\downarrow peak} + E(0) - \frac{\varDelta(V_{\downarrow peak},k_{\parallel})}{2} \tag{4-4}$$

となり、伝導帯エッジを共鳴準位が下回るときの共鳴準位の高さは等しいと考えられるため、$E_{\uparrow}\left(V_{\uparrow peak},k_{\parallel}\right) = E_{\downarrow}\left(V_{\downarrow peak},k_{\parallel}\right)$と仮定すると、$\varDelta V = V_{\uparrow peak} - V_{\downarrow peak}$より、

$$\Delta V = \frac{1}{2\eta}\left\{\varDelta\left(V_{\uparrow peak},k_{\parallel}\right) + \varDelta\left(V_{\downarrow peak},k_{\parallel}\right)\right\} \tag{4-5}$$

となり、$\varDelta V$ と $\varDelta$ の関係式を導出することができる。しかし、$\varDelta$ は$k_{\parallel}$依存の値であるため定量的評価が難しい。$k_{\parallel}$は、図 4－15 に示すように 0[K]のような極低温化において、共鳴準位E_zのとき 0 から$(k_F^2 - k_z^2)^{1/2}$までの値をとることができる。ただし、k_Fはフェルミ準位における波数、k_zはE_zにおける波数を示す。もし$k_z \approx 0(E_z = 0)$であれば、$k_{\parallel}$は 0 からk_Fまでの値をとることになる。そこで、波数$k_{\parallel}$をもつ電子の状態数は$2\pi k_{\parallel}$となることから、同じ z 方向のエネルギー$\mathrm{E_z}$をもつ電子の総和と重みつき総和は、

$$\int_0^{k_F} 2\pi k_{\parallel} dk_{\parallel} = \pi k_F^2 \tag{4-6}$$

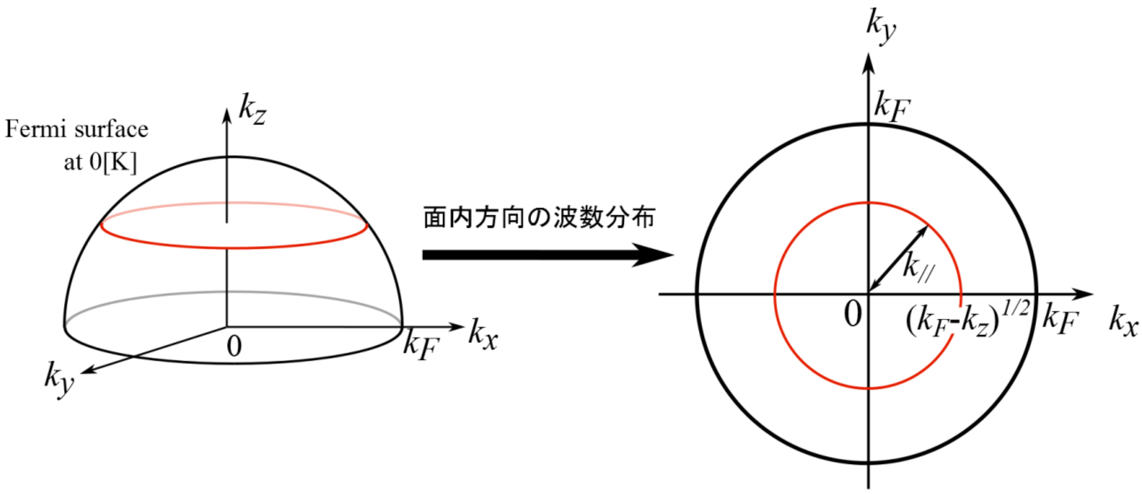

図 4－15　エミッタにおけるフェルミ球と面内方向の波数分布

$$\int_0^{k_F} k_\parallel \cdot 2\pi k_\parallel dk_\parallel = \frac{2}{3}\pi k_F^3 \tag{4-7}$$

となるため、$k_\parallel$の重みつき平均は、

$$\text{Weight averaged } k_\parallel = \frac{\frac{2}{3}\pi k_F^3}{\pi k_F^2} = \frac{2}{3}k_F \tag{4-8}$$

と表すことができる。この$k_\parallel$の重みつき平均を式(4-5)に代入することで、

$$\Delta V = \frac{1}{2\eta}\left\{\Delta\left(V_{\uparrow peak}, \frac{2}{3}k_F(V_{\uparrow peak})\right) + \Delta\left(V_{\downarrow peak}, \frac{2}{3}k_F(V_{\downarrow peak})\right)\right\} \tag{4-9}$$

$k_\parallel$依存のない ΔV と Δ の関係式を導出することができる。

次に、式(3-17)を用いた *dJ/dV-V* 特性のシミュレーション結果から読み取った ΔV と式(4-9)から得られる ΔV の比較をし、式(4-9)の妥当性について検討した。その結果を図 4－16 に示す。検討には、シミュレーション結果からの読み取り誤差を小さくするために、対称/非対称構造それぞれの中で大きな$\alpha(V_{peak})$を示す i.井戸幅=15nm の対称構造と ii.井戸幅=6.7nm, step 高さ=0.15eV, iii.井戸幅=10nm, step 高さ=0.2eV, iv.井戸幅=15nm, step 高さ=0.15eV の非対称構造の 4 つ構造を用いた。ただし、$E_F = 0.1\text{eV}, \Gamma = 5\text{meV}$とした。図 4－16 より 4 つ構造全てにおいて、誤差10^{-3}の範囲で一致しているため式(4-9)は正しいことを示した。よって、*dJ/dV-V* 特性からピーク間隔 ΔV を抽出することができた場合、簡易的かつ精度よくスピン分離量 Δ を評価することが可能であることを示した。しかし、$k_\parallel$の重みつき平均に関して、0 から$(k_F^2 - k_z^2)^{1/2}$までの値を持つ$k_\parallel$をk_Fで近似しているため、k_Fが大きくなると近似の精度が低下すると考えられるため、今後、式(4-9)におけるk_F依存性について検討する必要がある。

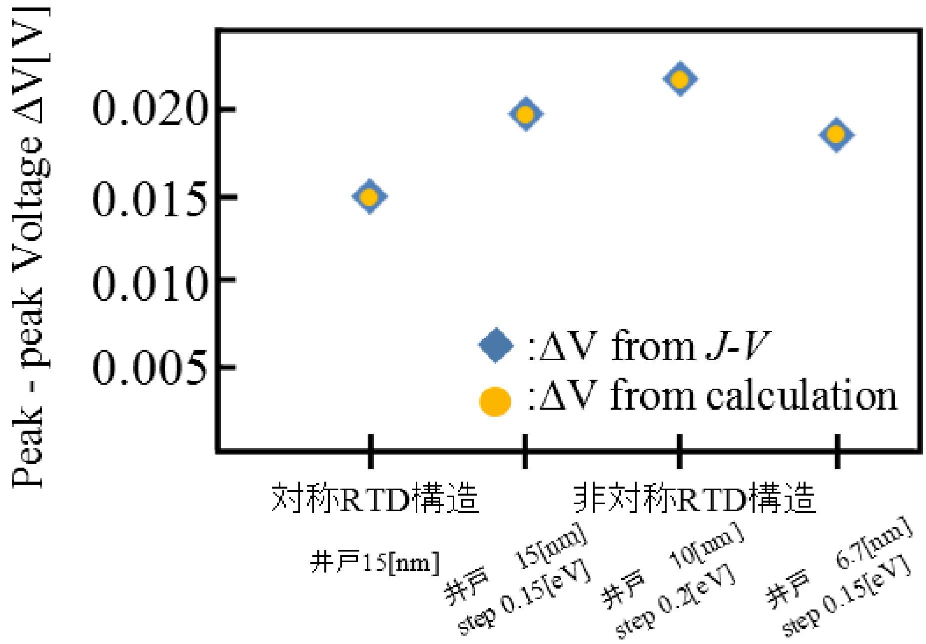

図 4－16　*J-V* 特性から得られる *ΔV* と式(4-9)から得られる *ΔV* の比較

第五章

—総括—

5.1　まとめ

　第一章「序論」では、研究背景、目的について述べた。近年の半導体デバイスにおいて、微細加工技術や性能向上の微細化に関する問題を挙げた。そして微細化限界突破のための提案として挙げられるスピントロニクスデバイスについて述べた。スピントロニクスデバイス実現のために、密接に関わるスピン軌道相互作用(SOI)に関して、電界のみによる SOI の定量的評価が未確立であり課題があることを提起した。そこで本研究では、電界のみによる SOI を評価するために InSb 系共鳴トンネルダイオード(RTD)を採用し、スピン分離を考慮した *J-V* 特性を計算するシミュレーションプロセスの確立、SOI に起因したスピン分離が観察可能な RTD 構造の提案を目的とした。

　第二章「Ⅲ-V 族化合物半導体の特性と電界のみによる SOI の評価原理」では、研究に用いた材料である InSb、AlSb を中心にⅢ‐V 族化合物半導体の特性について述べた。また、RTD の構造、動作原理について述べたのち、本研究における RTD を用いたスピン分離評価について述べた。本研究では、RTD のスピン分離を考慮した *J-V* 特性から電界のみによる SOI を評価するために、スピン分離観察が可能な RTD 構造を検討していくことを示した。また、スピン分離観察において理想的な *J-V* 特性と悪条件での *J-V* 特性の比較からスピン分離を評価するために必要な条件を整理した。

　第三章「評価のためのシミュレーションプロセスの確立」では、nextnano3 を用いたバンドシミュレーション、スピン分離を考慮した *J-V* 特性の理論式の導出について述べた。バンドシミュレーションから所望の RTD 構造におけるバンド構造、共鳴準位、電子確率密度、内部電界、及びそれらの電圧依存性を抽出することで、SOI の Rashba 効果の大きさを示す Rashba パラメータ : α を計算し、スピン分離を考慮した *J-V* 特性の計算をするプロセスを確立した。さらに、より厳密な検討をするために材料間の格子不整合に起因した歪と *E-k* 分散の非放物線成分を考慮するバンドシミュレーションと *J-V* 特性の計算手法を確立した。

　第四章「スピン分離観察のための RTD 構造の検討」では、第三章で示したシミュレーションプロセスを用いて対称/非対称 RTD 構造におけるスピン分離観察が可能な構造の提案について述べた。それぞれの構造での α の構造依存性と、大きな α を示す構造における *J-V* 特性からスピン分離評価の可能性を検討した。対称構造では、十分大きなスピン分離量を得ることができず、*J-V* 特性の共鳴準位幅:Γ 依存性から、スピン分離観察が困難であることを示した。また、より大きなスピン分離量を得るために界面効果項を増大させる必要性を

示した。そこで、非対称構造を用いることで界面効果項の増大を目指した。非対称構造では、α の井戸幅、step 高さ依存性から特定の構造パラメータ内で α が大きくなることを示した。歪を考慮した場合、AlInSb の引っ張り歪により step の影響が小さくなるが、対称構造と比較して α が 1.3~1.5 倍大きくなることを示した。また大きな α を示す構造における *dJ/dV-V* 特性の Γ 及び電子供給層のフェルミ準位:E_F依存性から、0.15eV 以上のE_Fにおいて、Γ＝5～15meV で 2 つの凸を分けて評価できることを示した。以上より非対称構造では、大きな α を示す構造を用いることで既報告[10]の InSb 系 RTD における共鳴準位幅を想定した場合にスピン分離観察ができることを示した。ここまでの検討から、最も大きな α をもつ非対称構造：井戸幅=10nm,組成比=0.146(歪を考慮した step 高さ=0.154eV),バリア幅=2.2nm を本研究における最適構造とした。また、E_Fが0.1eVのときΓは5meV以下であること、E_Fが0.15eV以上のときΓは$\leq$ 15meV 以下であることをスピン分離観察するための必要条件であることを示した。さらに現実的な検討をするために、最適構造を用いてスピン分離観察への *E-k* 分散の非放物線成分の影響を検討した。その結果αに関して、有効質量の増加に伴い、波動関数の量子井戸からの滲み出しが小さくなったことで界面効果項が減少することを示した。しかし *dJ/dV-V* 特性の Γ 依存性の検討から$5 \leq \Gamma \leq 15$meV において 2 つの凸を観察することができることを示した。そのためスピン分離観察への *E-k* 分散の非放物線成分の影響が小さいことを示唆した。また、*dJ/dV-V* 特性のピーク間隔:ΔV とスピン分離量:Δ の関係式を導出することで、*dJ/dV-V* 特性の実験値から ΔV を抽出することができた場合、簡易的にスピン分離量を評価する手法を提案した。

以上のように、本研究では、第一にスピン分離を考慮した *J-V* 特性を計算するためのバンドシミュレーションと数値解析を用いたシミュレーションプロセスの確立をした。第二に、対称/非対称 RTD 構造における α の構造依存性を明らかにし、非対称構造において最も α が大きくなる構造を最適構造として提案し、α を減少させる物理を考慮した場合でも *J-V* 特性からスピン分離観察が可能であることを示唆した。また、実験的にスピン分離した *J-V* 特性を得られた場合における簡易的なスピン分離量の評価手法を提案した。今回の検討では、*E-k* 分散への非放物線成分の考慮を α が最も大きい最適構造のみに適用した。そのため今後、その他の構造にも適用することで、α の構造依存性への影響を検討する必要がある。

5.2　今後の展望

本研究では、第一にスピン分離を考慮した *J-V* 特性を計算するためのシミュレーションプロセスを確立し、第二に 2 種類の RTD 構造の α の構造依存性を明らかにしたのち、スピン分離観察が可能な RTD 構造、スピン分離観察をするための条件を提案した。将来的に、作製プロセスを確立し、提案した構造の作製、実験的な *J-V* 特性の測定をすることで、以下に示すような検討をしていきたいと考えている。

・*J-V* 特性から実験的にスピン分離観察ができるかどうか。できた場合、本研究にて確立したシミュレーションプロセスを用いることにより実験的に Δ、α、Γ を評価。SOI 関連パ

ラメータの温度依存性について評価。

・外部磁場を用いた SOI の測定手法との比較。

・いくつかの構造を用いた検討からシミュレーションと同様の結果を得られているかどうか。得られなければ要因はなにか検討。

以上の検討から、本研究により確立されたシミュレーションプロセスの正確性を示した上で、実験的に SOI 関連パラメータの評価ができるようになる。それにより電界のみによる SOI の評価手法の確立へ近づくだろう。また RTD に限らず任意のデバイス構造における SOI 関連パラメータの評価手法の提案に繋がると考えられる。更には今後、InSb 系 Spin-FET のために必要な InSb 系量子井戸における SOI 関連パラメータの設計指針の確立に繋がるだろう。

参考文献

[1] S. Datta and B. Das, “Electronic Analog of the electro-optic modulator,” Appl. Phys. Lett., vol.56, pp.665-667, 1990.

[2] 江藤幹雄、慶應義塾大学、「半導体中のスピン軌道相互作用入門」

[3] Th. Schäpers, G. Engels, J. Lange, Th. Klocke, M. Hollfelder, and H. Lüth, “Effect of the heterointerface on the spin splitting in modulation doped InxGa1−xAs/InP quantum wells for B→0,” J. Appl. Phys., vol.83, no.8, pp4324-4333, 1998.

[4] B. Das, S. Datta, and R. Reifenberger, “Zero-field spin splitting in a two-dimentional electron gas,” Phys. Rev. B., vol.41, pp.8278-8287, 1990.

[5] J. Nitta, T. Akazaki, and H. Takayanagi, “Gate control of spin-orbit interaction in an inverted In0.53Ga0.47As / In0.52Al0.48As heterostructure,” Phys. Rev. Lett., vol.78, pp.1335-1338, 1997.

[6]藤田　昌成、首都大学東京大学院、理工学研究科電気電子工学専攻、平成24年度　修論分「InSbにおけるスピン分離観察のための共鳴トンネルダイオード設計と作製に関する研究」

[7] M. Linnik, and A. Christou, “Calculations of optical properties for quaternary III-V semiconductor aloys in the transparent region and above (0.2-0.4 eV),” Physica B, Vol. 318, pp. 140-161, 2002

[8] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, and L.R. Ram-Mohan, “Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys,” J. Appl. Phys. Vol. 89, No. 11, pp. 5815~5875, 2001

[9] G.Gulyamov, P. J. Baymatov, B. T. Abdulazizov, “Effect of Temperature and Band Nonparabolicity on Density of States of Two Dimensional Electron Gas,”　J. Appl. Math. Phys, 2016, 4, 272-278

[10] J. R. Söderström, J. Y. Yao, and T. G. Andersson, “Observation of resonant tunneling in InSb/AlInSb double-barrier structure,” Appl. Phys. Lett., vol.58, pp.708-710, 1990.

[11] H. Shin-ya, M. Suhara, N. Asaoka, and M. Naoi, “Implementation of physics-based model for

current-volrage characteristics in resonant tunneling diodes by using the voigt function," IEICE Trans. Electron., vol. E93-C, no.8, pp.1295-1301, 2010.

[12] Oszwaldowski, M. and Zimpel, "Temperature dependence of intrinsic carrier concentration and density of states effective mass of heavy holes in InSb," J. Phys. Chem. Solids 49, 10 (1988) 1179-1185

謝辞

本研究をすすめるにあたり、指導教員の須原教授には熱心なご指導をしていただいたことを深く感謝申し上げます。研究のゴールに対するアプローチの方法、研究に取り込む上での姿勢、考え方、様々なご指導をいただきました。また日頃から研究室に足を運んでいただき、そこから始まるディスカッションにより不明な点を解決できるまでご一緒に考えていただいました。そのような短時間のディスカッションにおいても研究は前進することができました。3 年間に渡って、ご指導、ご鞭撻をいただいたことを深く感謝いたします。

斉藤光史助教には、自分がわからない点には理解できるまで教えていただき、時には夜遅くまで残って研究にお付き合いしていただき、また、ディスカッションにおいて自分とまったく違う視点からの有用なご指摘をいただきました。研究を進めていく上で挙がる些細なことや研究の進め方など、研究に関して一から丁寧にご指導をしていただきましたことを深く感謝申し上げます。

奥村次徳名誉教授、中村成志准教授には、機会は少なかったですが、合同報告会においてご質問をいただくことで自分の理解を怠っている点に気付くことができました。合同報告会、また日頃から研究室に足を運んでいただいた際には、有用なご指摘をしていただいたことに深く感謝申し上げます。

デバイス研究室の同期には、この 3 年間のなかで多くの時間を共に過ごし、お互いがお互いを刺激しあい切磋琢磨することができました。ここに深く感謝申し上げます。

デバイス研究室の後輩とは、ときには研究について話し合い、ときには研究とは関係のないことで笑いあい、とても刺激的な日々を過ごすことができました。ありがとうございました。