

シリコンのピエゾ抵抗効果におけるスピン-軌道相互作用の影響

(立命大ナノマシン¹, 神戸大院工², 立命大理工³, 立命大 R-GIRO⁴)○中村 康一¹, 磯野 吉正², 鳥山 寿之^{1,3}, 杉山 進^{1,4}

【序】 ピエゾ抵抗効果は半導体における重要な基礎物性であり、1954年にSmithがドープシリコンについてのピエゾ抵抗係数を報告して以来^[1], 応力印加と伝導性との関連について実験・理論の両面から多くの研究が行われている。我々は電子状態計算に基づきドープ半導体のピエゾ抵抗係数を計算する簡便なシミュレーション手法を開発し^[2,3], n型半導体バルクシリコンにおけるピエゾ抵抗係数のキャリア濃度・温度依存性が正確に再現できることを示したが^[2], p型半導体バルクシリコンにおいては、応力ひずみによる価電子帯バンドシフトの大きさとスピン-軌道相互作用による価電子帯バンド分裂幅がほぼ同じオーダーであるために、応力を印加したときのホール分布の様子が非常に複雑なものとなり、p型半導体バルクシリコンのピエゾ抵抗係数導出を困難にしている。本研究ではシリコン系においてスピン-軌道カップリングの分裂幅をKohn-Sham軌道を用いた摂動論に基づいて定量的に計算することにより、スピン-軌道バンド分裂に起因するホール分布や有効質量の変化を表現し、スピン-軌道カップリングがシリコンのピエゾ抵抗効果に及ぼす影響について考察した。

【計算手法】 バンド構造の計算はGGA汎関数を用いた密度汎関数法により行った。p型半導体シリコンでは、低次元系も含めて価電子帯エネルギー極大点が逆格子空間の原点(Γ 点)に位置する^[3-5]。バルクシリコンのバンド構造を通常密度汎関数計算により求めると、応力のない場合に価電子帯最上部にある3つのバンドが Γ 点で三重縮退するが、これはスピン-軌道カップリングの効果を全く考慮していないからであり、実際には Γ 点においてバンド分裂が生じている。このバンド分裂はホールのバンド占有比率に大きな影響を及ぼすため、ピエゾ抵抗係数を導出する際に無視することができない。さらに、ホールの有効質量に対するスピン-軌道カップリングの影響も考慮する必要がある。逆格子空間上の各点におけるスピン-軌道カップリングによるバンドエネルギーシフト $\Delta E_j^{SO}(\mathbf{k})$ を定量的に取り扱わなければならない。

スピン-軌道カップリングに関する摂動ハミルトニアンは、系のポテンシャル $V(\mathbf{r})$ 、運動量ベクトル \mathbf{p} 、およびパウリのスピン行列ベクトル $\boldsymbol{\sigma}$ を用いて

$$\hat{H}_{SO} = (\hbar/4m^2c^2)(\nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (1)$$

と書ける。ここで、 m は電子の静止質量、 c は光速である。摂動法の基底として、価電子帯最上部にある3つのバンドのKohn-Sham軌道を用いた系 $\{|1\uparrow\rangle, |1\downarrow\rangle, |2\uparrow\rangle, |2\downarrow\rangle, |3\uparrow\rangle, |3\downarrow\rangle\}$ を考えると、摂動ハミルトニアン行列要素は

$$\langle j'\uparrow | \hat{H}_{SO} | j\uparrow \rangle = \frac{i\hbar^2}{4m^2c^2} \langle j' | \left(\frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} \right) | j \rangle \quad (2a)$$

$$\langle j'\uparrow | \hat{H}_{SO} | j\downarrow \rangle = \frac{i\hbar^2}{4m^2c^2} \left[\langle j' | \frac{\partial V}{\partial z} \left(i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \right) | j \rangle - \langle j' | \left(\frac{\partial V}{\partial y} + i \frac{\partial V}{\partial x} \right) \frac{\partial}{\partial z} | j \rangle \right] \quad (2b)$$

$$\langle j'\downarrow | \hat{H}_{SO} | j\uparrow \rangle = \frac{i\hbar^2}{4m^2c^2} \left[\langle j' | \frac{\partial V}{\partial z} \left(-i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \right) | j \rangle - \langle j' | \left(\frac{\partial V}{\partial y} - i \frac{\partial V}{\partial x} \right) \frac{\partial}{\partial z} | j \rangle \right] \quad (2c)$$

$$\langle j' \downarrow | \hat{H}_{so} | j \downarrow \rangle = \frac{i\hbar^2}{4m^2c^2} \langle j' | \left(-\frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} \right) | j \rangle \quad (2d)$$

と展開される。(2)式によって得られる摂動ハミルトニアン行列を対角化することにより、摂動エネルギーとしてスピン-軌道カップリングに基づくバンドエネルギーシフト $\Delta E_j^{SO}(\mathbf{k})$ の値が得られ、各 \mathbf{k} 点に応じたバンド分裂幅が求まる。(2)式の計算は

$$F(\mathbf{G}) = \int d^3\mathbf{r} \psi_{j,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial \beta} \psi_{j,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \quad (3)$$

という形の高速フーリエ変換を新たに導入することにより行った。

ホールの電気伝導率テンソル \vec{G} は、各バンドに対して決まるバンドホール密度、バンド有効質量テンソル、緩和時間テンソルを用いて書くことができ、バンドホール密度 p_j は $\Delta E_j^{SO}(\mathbf{k})$ を加味したバンドエネルギーを用いて、フェルミエネルギー E_F と温度 T によって決定される。実際の p 型半導体では単位格子あたりのホールの数を δ とすると $\delta \ll 1$ であり、バンドエネルギーが真性半導体と同じであるという仮定の下にフェルミエネルギーをシフトさせることによってホールの数が δ となる占有状態を表現した^[3-5]。各バンドのキャリア有効質量テンソル \vec{m}_j^* は、その逆行列要素が $\Delta E_j^{SO}(\mathbf{k})$ を加味したバンド曲線の曲率を用いて定義される。また、緩和時間については、「すべてのバンドの緩和時間が等しく、ひずみのあるなしに関わらず一定」という近似を用いた。この取り扱いは一見粗いようにも思われるが、ピエゾ抵抗係数を求める際にはホール伝導率の比をとるので、緩和時間が打ち消されることを考慮すると簡単で有効な取り扱いである^[2]。

【結果および考察】 平面波展開波動関数のカットオフエネルギーを 40 Ry (544 eV) としてバルクシリコンでの Γ 点におけるバンド分裂幅 $\Delta_0(\mathbf{0})$ を計算すると、ひずみなしモデルにおける計算値は 0.061 eV (実測値 0.044 eV) が得られた。また、摂動エネルギーを加味する前後の有効質量テンソルの逆行列対角要素を付表に示す。ホール濃度が $2.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 、温度が 300 K におけるピエゾ抵抗係数の計算値は、 $\pi_{11} = 2.4 \times 10^{-11} \text{ Pa}^{-1}$ 、 $\pi_{12} = -1.1 \times 10^{-11} \text{ Pa}^{-1}$ 、 $\pi_{44} = 83.7 \times 10^{-11} \text{ Pa}^{-1}$ という結果が得られ、スピン-軌道カップリングの効果を加えることで実測値^[1]を定性的に表現することが可能になった。現状では、摂動法の計算結果に影響を与える平面波基底の展開数や、 \mathbf{k} 点に対する和をとる数値積分のサンプリング数 (\mathbf{k} 点ごとに摂動法の計算が必要) 等がまだ不十分であり、これらを改善することによってさらに高精度なピエゾ抵抗係数の予測ができる見込みである。また、二次元シリコン系 (シリコンナノシート) においては、低次元化による Γ 点バンド縮退の解け方から、スピン-軌道カップリングがピエゾ抵抗効果にほとんど影響しないことが予想される^[4]。詳細は当日発表する。

Table. Diagonal elements of reciprocal effective mass tensors $\partial^2 E_j / \partial k_i^2$ for subbands in valence-band top with/without spin-orbit (LS) coupling (in m_0^{-1} , inverse of electron rest mass).

Strain-free	No LS coupling		With LS coupling	
	k_x, k_y, k_z	k_z	k_x, k_y, k_z	k_z
Heavy-hole	3.5954		3.6365	
Light-hole	6.1159		5.5313	
Spin split-off	3.5954		4.2371	
[001] tensile	No LS coupling		With LS coupling	
	k_x, k_y	k_z	k_x, k_y	k_z
Highest	6.1345	3.5853	5.5448	3.6357
2nd highest	3.5779	6.1377	3.6349	5.5464
Spin split-off	3.5946	3.5853	4.2402	4.2410

[1] C. S. Smith, Phys. Rev. **94**, 42 (1954).

[2] K. Nakamura, Y. Isono, T. Toriyama, and S. Sugiyama, Phys. Rev. B **80**, 045205 (2009).

[3] K. Nakamura, Y. Isono, and T. Toriyama, Jpn. J. Appl. Phys. **47**, 5132 (2008).

[4] K. Nakamura, T. Toriyama, and S. Sugiyama, IEEJ Trans. Electr. Electron. Eng., submitted.

[5] K. Nakamura, Y. Isono, T. Toriyama, and S. Sugiyama, Jpn. J. Appl. Phys. **48**, 06FG09 (2009).