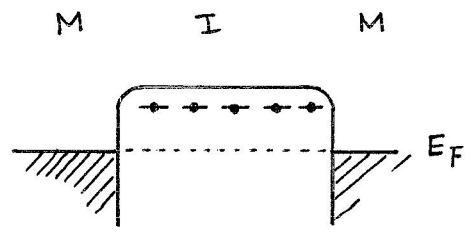


# 第2章 モデル

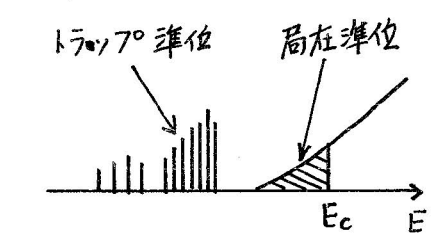
右図に示されたような、考えに基づいて絶縁体に注入された単一電荷(以後電子とする)の振舞いについて考察して行く。

## 1) Conduction

一般に、無定形の固体においては、結晶性の固体のような、明確なバンド構造は存在せず、特に絶縁体のような、電子の平均自由行程が、原子間隔と同程度と考えられる場合には、電子は局在化した準位を持つようになる。図の斜線部が局在準位の密度を表わしている。Ec以上のエネルギーでは状態は局在化せず拡がりを持つようになる。この部分は、通常の伝導帯と同じである。局在化準位は次のように特徴づけられている



M-I-M系のエネルギー図



状態密度

$$\lim_{T \rightarrow 0} \mu = 0$$

Tは絶対温度、μは移動度である。μは一般には、電子エネルギーに關係しているから

$$\mu = \mu(E, T)$$

と書かなくてはならない。有限温度においては、電子は局在準位間を、フォノン吸収により移動し、伝導に寄与する。このような伝導をホッピング伝導という。この時移動度は熱活性となり

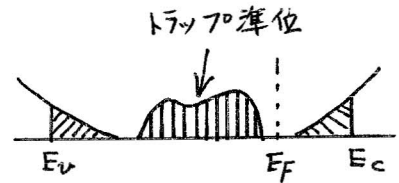
$$\mu = \mu_0 e^{-W/kT}$$

と書ける。Wは活性化エネルギーでμ0と共にEの関数である。

局在準位に存在する電子による伝導を調べるには、局在準位等についての、詳しい知識が必要であるから、ここでは簡単のため、 $\mu_0, W$ のE依存性を無視する。

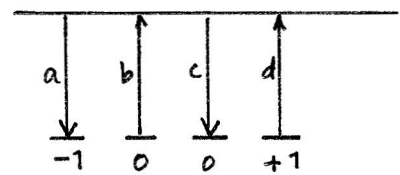
## 2) Trap Kinetics

一般には右図のように価電子帯まで含めて考えなくてはならないが、絶縁体では、伝導帯と価電子帯の間隔は非常に大きい。(ポリイソレンでは7eV程度) 従って、真性の伝導を示す事は考えられず、仮りに電子伝導とすれば、左ルミレベルは、伝導帯の近くに位置することになる。よってホールを無視する事ができ、電子のエネルギー図として最初を示したようなものを用いる事ができる。



電子を受け取った時イオン化するようなトラップをアクセプタ型と呼びその密度を  $N_A(E)$  とする。電子を失った時イオン化するトラップをドナ型と呼びその密度を  $N_D(E)$  とする。電子の移動過程として

図の4つがある。aはアクセプタに捕獲されてトラップが1価の負イオンとなる。負イオン状態のアクセプタから電子が放出されて、アクセプタは中性となる(b), 正イオンとなってい



たドナに電子が捕獲されてドナが中性となる(c), 中性のドナから電子が放出されてドナが正イオンとなる。従って局在準位の電子数を  $n$  とすると、そのトラップによる変化は

$$\left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{\text{trap}} = -n \int C_A(E) N_A(E) (1 - f_A(E)) dE \quad (\text{a process})$$

$$- n \int C_D(E) N_D(E) (1 - f_D(E)) dE \quad (\text{c})$$

$$+ \int e_A(E) N_A(E) f_A(E) dE \quad (\text{b})$$

$$+ \int e_D(E) N_D(E) f_D(E) dE \quad (\text{d})$$

ここで積分はトラップ分布に渡ってとる。  $f_A(E)$ ,  $f_D(E)$  はそれぞれアクセラタ, ドナの占有確立である。  $C_A, C_D$  は電子の捕獲の割合を表わす定数,  $e_A, e_D$  は電子の放出の割合を表わす定数である。これらの定数には, 平衡状態における関係から, 各トラップにおけるつりあいを考える事, 及び

$$f_A(E) = f_D(E) = \frac{1}{1 + \exp(E - E_F)/RT} \equiv f_F(E)$$

が熱平衡において, トラップの縮退を1として成立する事から。

$$e_A(E) f_F(E) = C_A(E) (1 - f_F(E)) n_0$$

$$e_D(E) f_F(E) = C_D(E) (1 - f_F(E)) n_0$$

従って

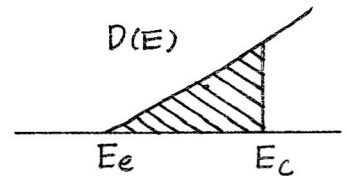
$$e_A(E) = C_A(E) n_0 e^{(E - E_F)/RT}$$

$$e_D(E) = C_D(E) n_0 e^{(E - E_F)/RT}$$

が成立する。  $n_0$  は熱平衡における局在準位中の電子数である。  $E_F$  はフェルミエネルギーである。局在準位密度を  $D(E)$  とすれば

$$n_0 = \int_{E_e}^{E_c} D(E) f_F(E) dE$$

$$\approx \int_{E_e}^{E_c} D(E) e^{(E_F - E)/RT} dE$$



また不平衡状態では,  $f_A, f_D$  は次の式に従って変化する

$$\frac{\partial}{\partial t} (N_A(E) f_A(E, t) dE) = n C_A(E) N_A(E) (1 - f_A(E)) dE - e_A(E) N_A(E) f_A(E, t) dE$$

右辺の第1項は捕獲による増加, 第2項は放出による減少を表わしている。書き換えて

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_A}{\partial t} &= n C_A (1 - f_A) - e_A f_A \\ &= C_A \left[ n (1 - f_A) - n_0 e^{(E - E_F)/RT} f_A \right]\end{aligned}$$

同様の式がドナキについても成立する。

$E_F$ は熱平衡におけるフェルミエネルギーで中性条件から

$$\begin{aligned}0 &= n_0 + \int N_A f_F dE - \int N_D (1 - f_F) dE \\ &= n_0 + \int \frac{N_A(E) dE}{1 + e^{(E - E_F)/RT}} - \int \frac{N_D(E) e^{(E - E_F)/RT} dE}{1 + e^{(E - E_F)/RT}}\end{aligned}$$

となり, これから決定される。

基本式

連続の式

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial J_c}{\partial x} + \left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{\text{trap}}$$

$$J_c = -D \frac{\partial n}{\partial x} - \mu F n$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{\text{trap}} &= -n \int C_A N_A (1-f_A) dE \\ &\quad - n \int C_D N_D (1-f_D) dE \\ &\quad + n_0 \int C_A N_A e^{(E-E_F)/kT} f_A dE \\ &\quad + n_0 \int C_D N_D e^{(E-E_F)/kT} f_D dE \end{aligned}$$

トラップの運動方程式

$$\frac{\partial f_A}{\partial t} = C_A \left[ n(1-f_A) - n_0 e^{(E-E_F)/kT} f_A \right]$$

$$\frac{\partial f_D}{\partial t} = C_D \left[ n(1-f_D) - n_0 e^{(E-E_F)/kT} f_D \right]$$

ポアソンの式

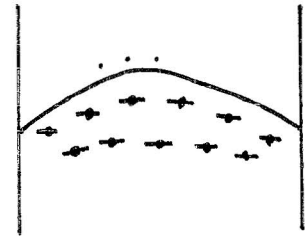
$$\frac{\partial F}{\partial x} = \frac{1}{\epsilon} \left[ -en - e \int N_A f_A dE + e \int N_D (1-f_D) dE \right]$$

近似

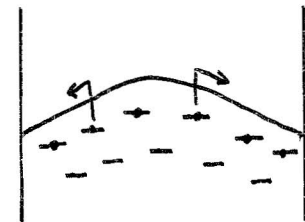
基本式を直接解く事は困難であるから、適切な近似を行なう事は重要である。

ここで、注入電荷による熱刺激電流の発生について簡単に見ていく

右図は電子注入を行ない冷却後の試料の様子を示している。注入された電子は、トラップ電子、又は伝導電子となり局所的な熱平衡状態にあると考えられる。



上の状態から昇温すると、トラップ電子のあるものは放出されて伝導電子となり、あるものは伝導電子となって再びトラップされる。



以上の過程をフェルミエネルギーの変化により考える

$$\begin{aligned}
 N_0 &= \int_{E_e}^{E_c} D(E) e^{(E_F - E)/RT} dE \\
 &= e^{(E_F - E_a)/RT} \int_{E_e}^{E_c} D(E) dE, \quad E_e < E_a < E_c \\
 &\equiv N_c e^{(E_F - E_a)/RT}
 \end{aligned}$$

ここで、 $E_a$ は現在の温度範囲では変化しないと仮定する。従って、熱平衡におけるフェルミエネルギー $E_F$ は次式で決められる

$$0 = N_c e^{(E_F - E_a)/RT} + \int \frac{N_A(E) dE}{1 + e^{(E - E_F)/RT}} - \int \frac{N_D(E) dE}{1 + e^{(E_F - E)/RT}}$$

$E_F$ の温度変化の様子を知るため両辺を $T$ で微分して $E_F$ の微係数の符号について調べる

$$0 = N_0 e^{(E_F - E_a)/kT} \frac{d}{dT} \frac{E_F - E_a}{kT} + \int \frac{(N_A + N_D) \frac{d}{dT} \frac{E_F - E}{kT} dE}{(1 + e^{(E - E_F)/kT})(1 + e^{(E_F - E)/kT})}$$

$$\approx N_0 e^{(E_F - E_a)/kT} \frac{d}{dT} \frac{E_F - E_a}{kT} + kT (N_A(E_F) + N_D(E_F)) \frac{d}{dT} \frac{E_F - E}{kT} \Big|_{E=E_F}$$

ここで、被積分関数の分母が  $E$  において鋭いピークを持つ事を用いた。また、 $\bar{N}_A, \bar{N}_D$  等は  $E=E_F$  の周わり  $kT$  で平均した事を意味している。これから

$$\frac{dE_F}{dT} < 0$$

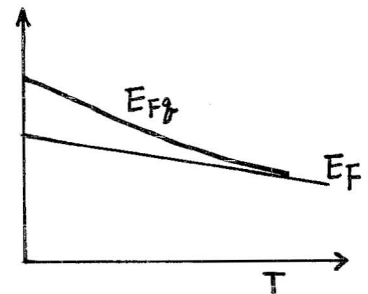
となり熱平衡フェルミエネルギーは温度の上昇とともに減少する。

注入を行ない冷却後の局所平衡における準フェルミレベル  $E_{Fg}$  は容易に分かるように電子注入においては

$$E_{Fg} > E_F$$

が成立する。

注入単一電荷の熱刺激緩和は右図に示したように、準フェルミレベル  $E_{Fg}$  が昇温に従って真のフェルミレベル  $E_F$  に漸近する過程である。しかし、昇温過程は定常状態でも平衡でももちろぬから、上に述べた準フェルミレベルの意味は明らかではない。



簡単のためトラップはエネルギー的に離散分布をしているとして考える。トラップは昇温とともに正味の放出を行なうものと、そうでないものに分けられる。一般に温度上昇とともに、フェルミレベルより上にあるトラップは正味の捕獲を行ない、下にあるものは、正味の放出を行なう。これらの動きを代表させるため、2種類のトラップを考える

- 1) 冷却時の  $E_{F2}$  より上に存在し, 常に伝導電子と平衡にある  
トラップ° (fast retrapping trap)
- 2) 冷却時の  $E_{F2}$  の下に存在し, 正味の放出に寄与するトラップ  
(Slow retrapping trap)

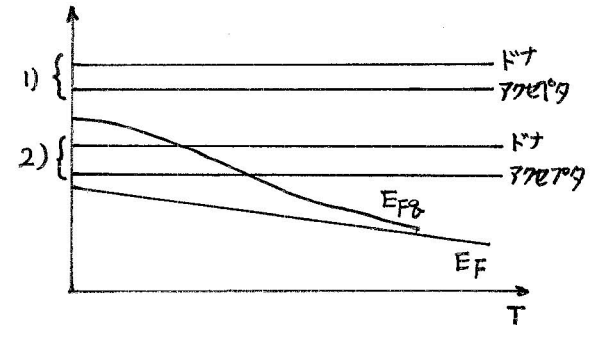
まず1)の場合を考える。平衡としてい  
から

$$C \left[ n(1-f) - n_0 e^{(E-E_F)/RT} f \right] = 0$$

よって

$$f = \frac{1}{1 + e^{(E-E_{F2})/RT}}$$

$$\approx e^{(E_{F2}-E)/RT}$$



これはかならずしも  $\partial f / \partial t = 0$  を意味するものではなく,  $C$  の大きさや  $n$  の変化によって, カッコ内が小さくなる事を意味する  
次に2)について考える

$$\frac{\partial f}{\partial t} = C \left[ N_c e^{(E_{F2}-E_a)/RT} (1-f) - N_c e^{(E-E_a)/RT} f \right]$$

$$= C N_c e^{-E_a/RT} \left[ -f (e^{E_{F2}/RT} + e^{E/RT}) + e^{E_{F2}/RT} \right]$$

$$= C N_c (e^{(E_{F2}-E_a)/RT} + e^{(E-E_a)/RT}) \left[ -f + \frac{1}{1 + e^{(E-E_{F2})/RT}} \right]$$

$$= \frac{1}{\tau} \left[ -f + \frac{1}{1 + e^{(E-E_{F2})/RT}} \right]$$

$$\tau = \frac{1}{C N_c e^{(E-E_a)/RT}} \frac{1}{1 + e^{(E_{F2}-E)/RT}}$$



τはトラップの緩和時と解せられる。通常の Slow retrapping の仮定では、

$$\tau_0 = \frac{1}{CN_0 e^{(E-E_a)/kT}} \quad \text{とし}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{f}{\tau_0}$$

のように近似する。明らかにこの仮定は、 $E_{FB}$  が  $E_F$  に近い事を要求し、これは、捕獲速度と比較して、伝導電子の移動が速い時に成り立つ。

$E_{FB}$  の移動を色々考えることにより、各種の近似を考える事ができる。

次にドナレについて考える。ドナは通常のオーミック電流に寄与するものである。ここでは、大変大きな近似であるが、次のような方法で考慮する。温度  $T$  における電導率を  $\sigma(T)$  とすると

$$\sigma(T) = e\mu(T)n_0(T)$$

である。ここでは、常に  $n_0(T)$  という寄与をドナが伝導電子に対して行なうとする。

以上の近似の範囲では、

$$\frac{\partial}{\partial t} (n + n_s + n_d) = -\frac{\partial}{\partial x} \mu_{(T)} F n + \left( \frac{\partial n}{\partial t} \right)_{\text{donor}}$$

$$n_s = \frac{N_s}{N_c} e^{(E_a - E_s)/kT} \cdot n$$

$$\frac{\partial n_d}{\partial t} = -\frac{n_d}{\tau_0}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} F = \frac{1}{\varepsilon} \left[ -e(n - n_0) - e(n_s - n_{s0}) - e n_d \right]$$

$n$ : 伝導電子数

$n_s$ : 浅いトラップの電子数

$n_d$ : 深いトラップの電子数

$F$ : 電界

$\mu$ : 移動度

$\varepsilon$ : 誘電率

$N_s$ : 浅いトラップの密度

$$n_{s0} = \frac{N_s}{N_c} e^{(E_a - E_s)/kT} n_0$$

$$\tau_0 = \frac{1}{C N_c} e^{(E_a - E_d)/kT}$$

$E_s$ : 浅いトラップのエネルギー

$E_d$ : 深いトラップのエネルギー

ここで、拡散は無視した。初期条件および境界条件は

$$n(x, 0) = \bar{n}_0(x)$$

$$\int_0^d F dx = 0, \text{ or } V$$

冷却後  $E_d$  は準フェルミレベルの下にあるとしているから、空間的分布は考えず

$$n_d(x, 0) = N_d$$

とする。  $N_d$  は深いレベルの密度である。電界に関する積分の上限  $d$  は試料厚さを示し、通常は短絡状態の規定が行なわれるから 0 ととり、特別に電圧印加の場合  $V$  とする。

変形

$$\frac{N_s}{N_c} e^{(E_a - E_s)/kT} = \theta^{-1}$$

$$\begin{aligned} \rho &= e(n - n_0) + e(n_s - n_{s0}) + e n_d \\ &= e(1 + \theta^{-1})(n - n_0) + e n_d \end{aligned}$$

とおけば

$$e \frac{\partial}{\partial t} (n + n_s + n_d) - e \left( \frac{\partial n}{\partial t} \right)_{\text{donor}} = \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \mu F n e = \frac{\partial}{\partial x} \mu F \left( \frac{\rho}{1 + \theta^{-1}} + e n_0 - \frac{e n_d}{1 + \theta^{-1}} \right)$$

と書けるから、 $n_d$ が一様であること、実効移動度 $\mu^*$ を次のように定義し

$$\mu^* = \frac{\mu}{1 + \theta^{-1}}$$

電導率 $\sigma$ を代入することにより、連続の方程式は次のように書ける

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \mu^* F \rho + \sigma(\tau) \frac{\partial F}{\partial x} - \mu^* e n_d \frac{\partial F}{\partial x}$$

ここで

$$\gamma(\tau) = \frac{\sigma}{\mu^*} - e n_d \quad \text{と用いねば}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \mu^* \left( \frac{\partial}{\partial x} F \rho + \gamma \frac{\partial F}{\partial x} \right) \quad \text{とせば}$$

ポアソンの式は

$$\frac{\partial F}{\partial x} = -\frac{1}{\epsilon} \rho$$

よって

$$\frac{1}{\mu^*} \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial F \rho}{\partial x} - \frac{\gamma}{\varepsilon} \rho$$

よって

$$\rho^* = \rho \exp\left[-\frac{1}{\varepsilon} \int_0^t \mu^* \gamma dt'\right]$$

$$F^* = F \exp\left[-\frac{1}{\varepsilon} \int_0^t \mu^* \gamma dt'\right]$$

$$\tau = \int_0^t \mu^* \exp\left[-\frac{1}{\varepsilon} \int_0^{t'} \mu^* \gamma dt''\right] dt'$$

と置くことにより、連続の方程式とポアソンの式は、

$$\frac{\partial \rho^*}{\partial \tau} = \frac{\partial F^* \rho^*}{\partial x}$$

$$\frac{\partial F^*}{\partial x} = -\frac{\rho^*}{\varepsilon}$$

と変形され、これはトラップの存在しない場合の式と同じ形式を持つ。

次に初期条件および境界条件がどのように変化するかを見る必要がある。

$t=0$  とすれば  $\rho^* = \rho$ ,  $F^* = F$  であるから

初期条件は全く変化しない。

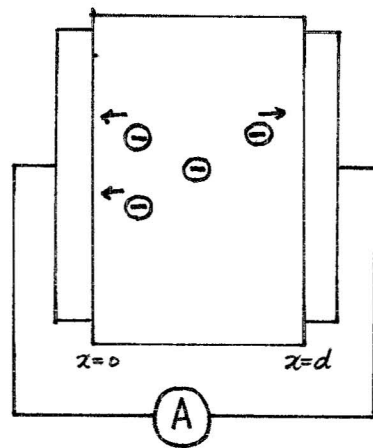
右図のような短絡回路(電圧源を入れることも

ある。)を流れる電流を  $I(t)$  とする

$$I(t) = \mu e n F + \varepsilon \frac{\partial F}{\partial t}$$

$$= \frac{\mu F \rho}{1 + \theta^{-1}} + \sigma F - \frac{\mu F e n d}{1 + \theta^{-1}} + \varepsilon \frac{\partial F}{\partial t}$$

$$= \mu^* F \rho + \mu^* \gamma F + \varepsilon \frac{\partial F}{\partial t}$$



この式の右辺が距離に依らない事は、連続の式、ポアソンの式から確かめることができる。ここでは、一般的に

$$\int_0^d F dx = V = \text{const.}$$

とする。従って

$$I(t) = -\frac{\varepsilon\mu^*}{2d} (F(d,t)^2 - F(0,t)^2) + \frac{1}{d}\mu^* \gamma V$$

と表わす事ができる。これを  $F^*$  を用いて書きかえれば

$$I(t) = \frac{\varepsilon\mu^*}{2d} \exp\left[\frac{-z}{\varepsilon} \int_0^t \mu^* \gamma dt\right] (F(0,t)^2 - F(d,t)^2) + \frac{1}{d}\mu^* \gamma V$$