



**i-PERC**

**電気通信大学**

# 基礎電子工学CH-5

**曾我部 東馬**

**電気通信大学**

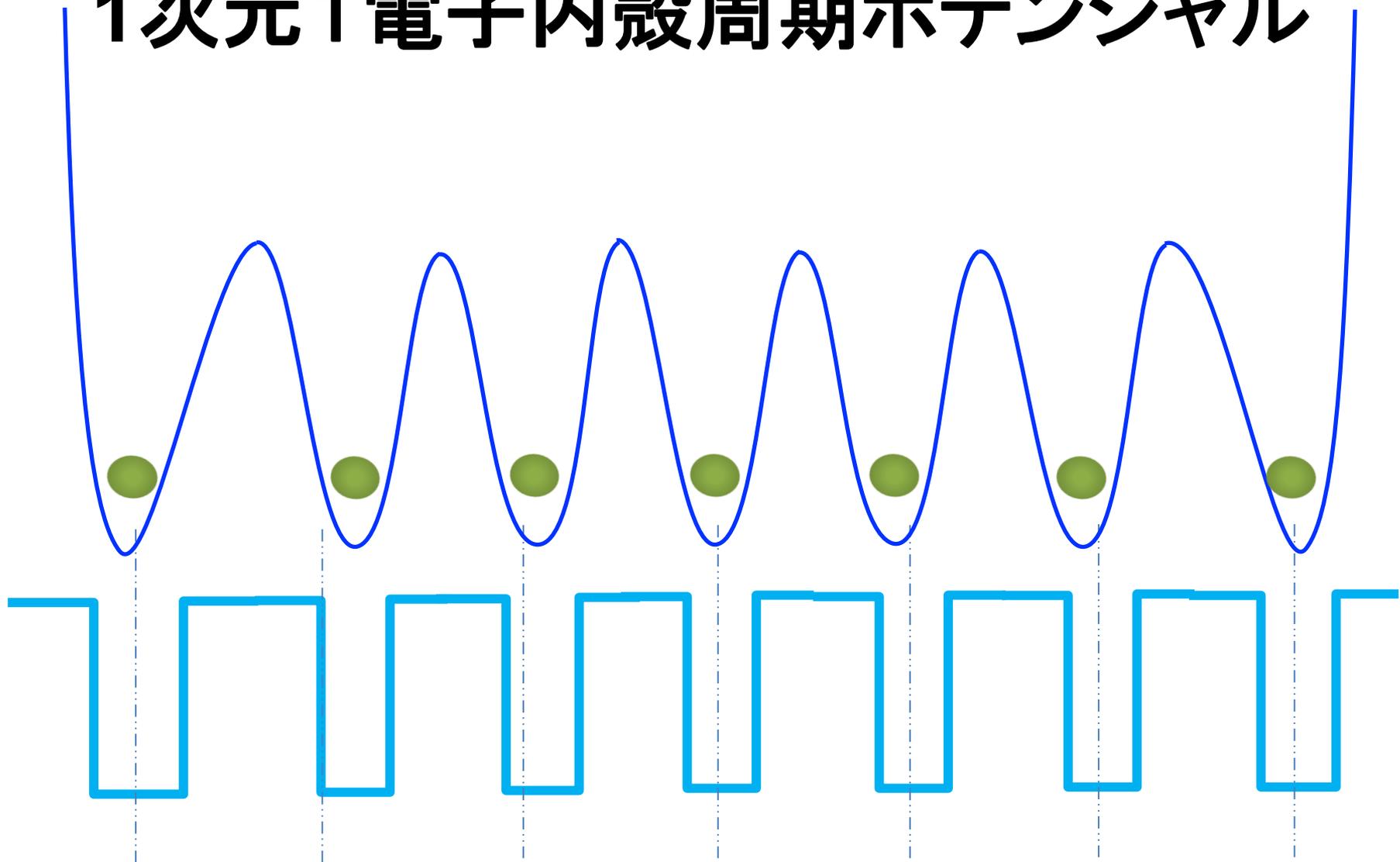
**i-パワードエネルギーシステム研究センター(i-PERC)**

# 概要:

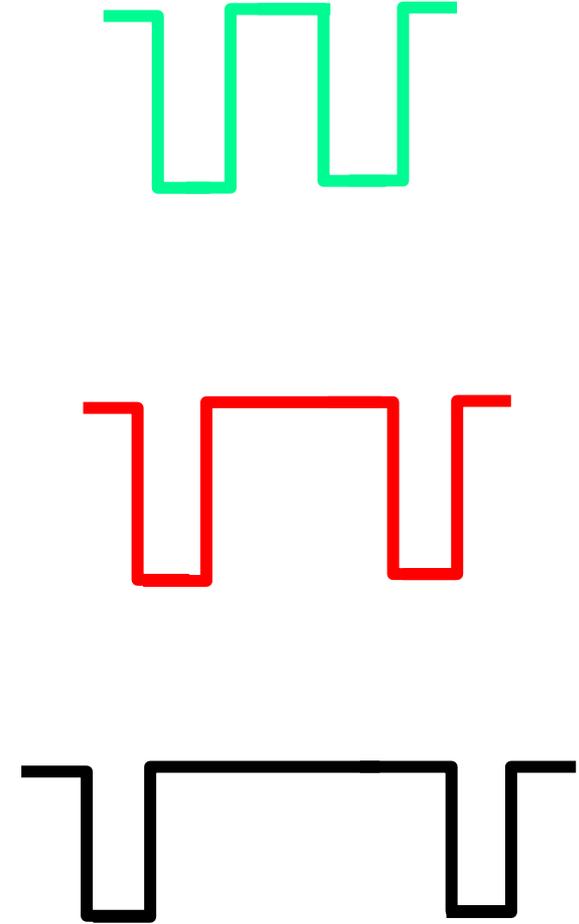
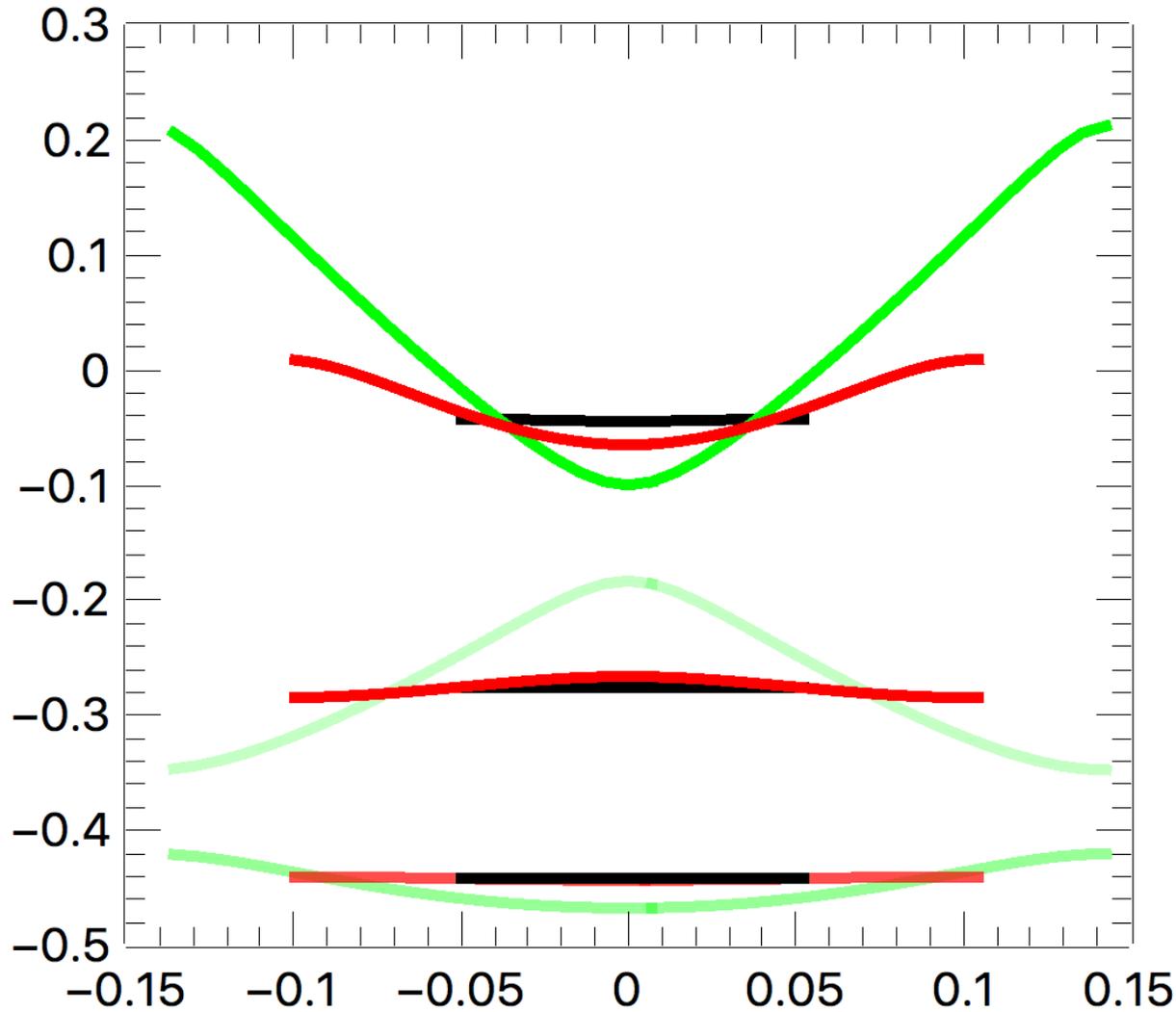
- 復習
- Siのバンド構造とバンドギャップ
- Siのバンド構造と伝導性の関係
- キャリア：電子とホール（正孔）
- Siに違う元素をドーピングする
- N型半導体、P型半導体

# 最も簡単なバンド計算:

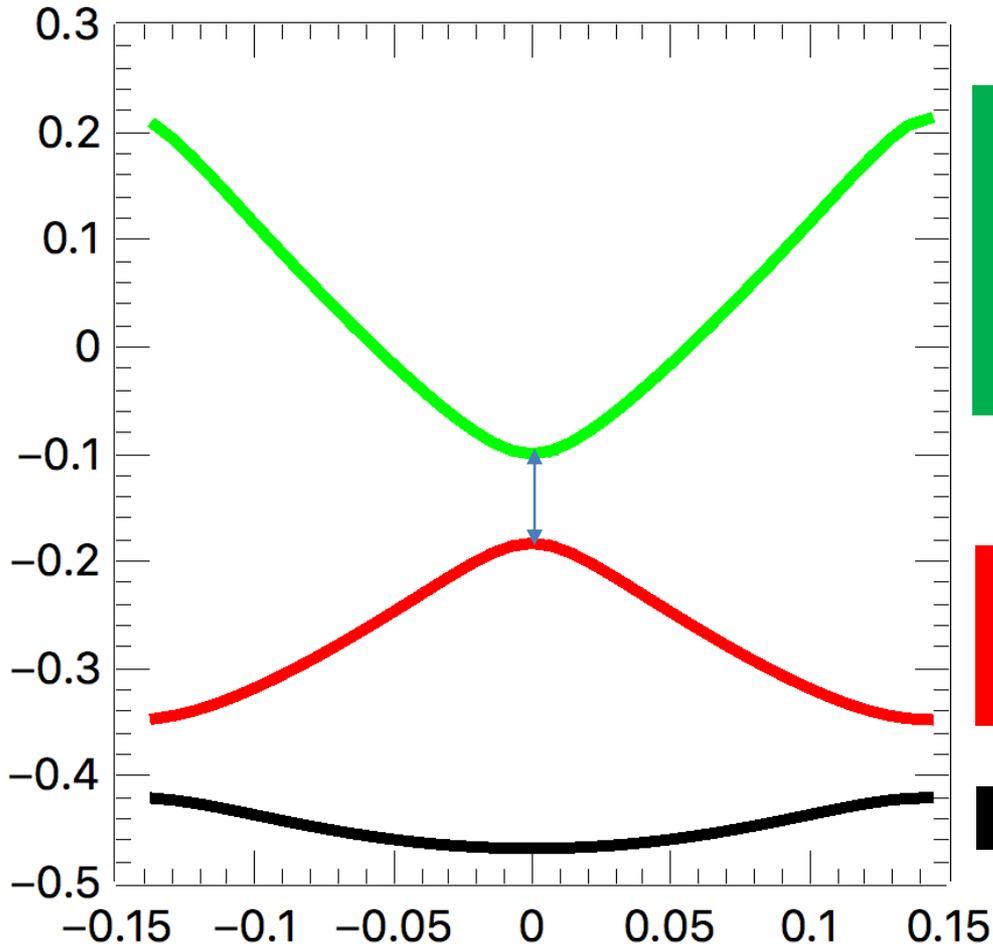
## 1次元1電子内殻周期ポテンシャル



# バンド幅と原子間距離の関係：



有効質量 $m^*$ が大きいとバンド幅は大きくなる



バンド3: 許容帯

バンドギャップ2: 禁止帯

バンド2: 許容帯

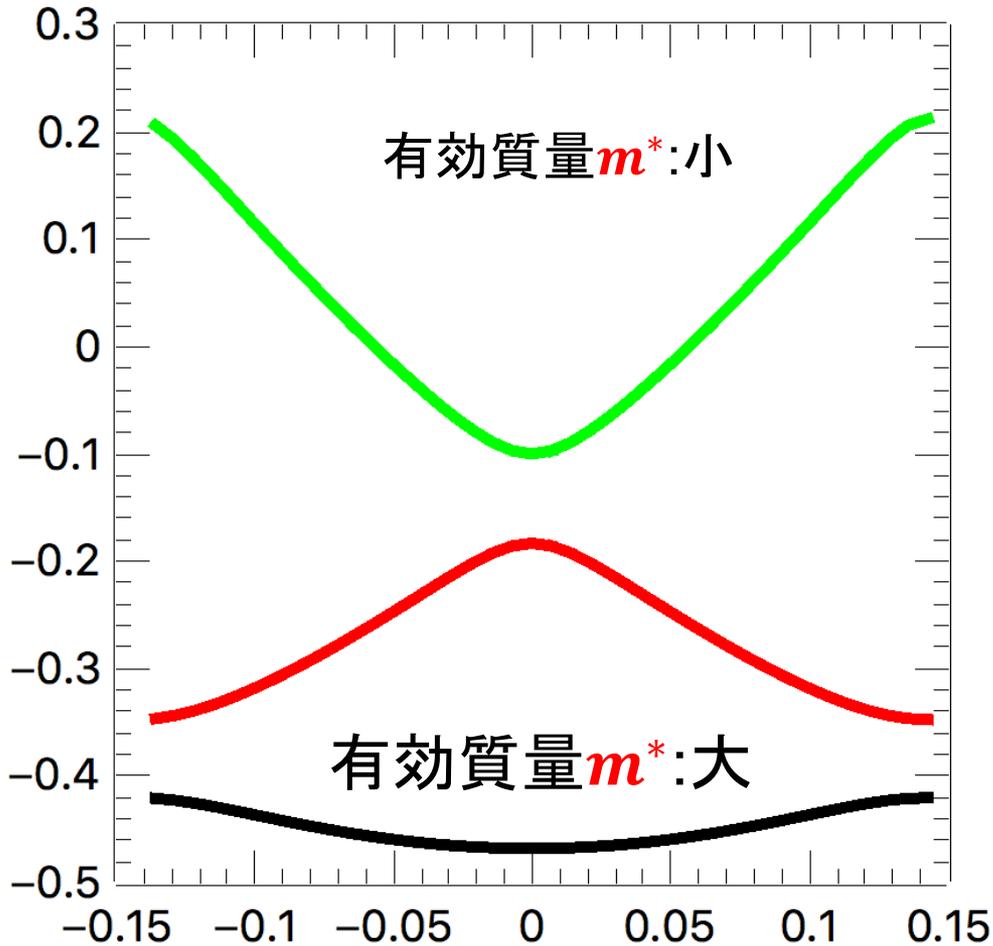
バンドギャップ1: 禁止帯

バンド1: 許容帯

有効質量 $m^*$ が大きいとバンド幅が小さくなり、バンドは平らになる

# 有効質量とバンドの関係：

有効質量 $m^*$ が小さくなればなるほど、自由電子に似ていく

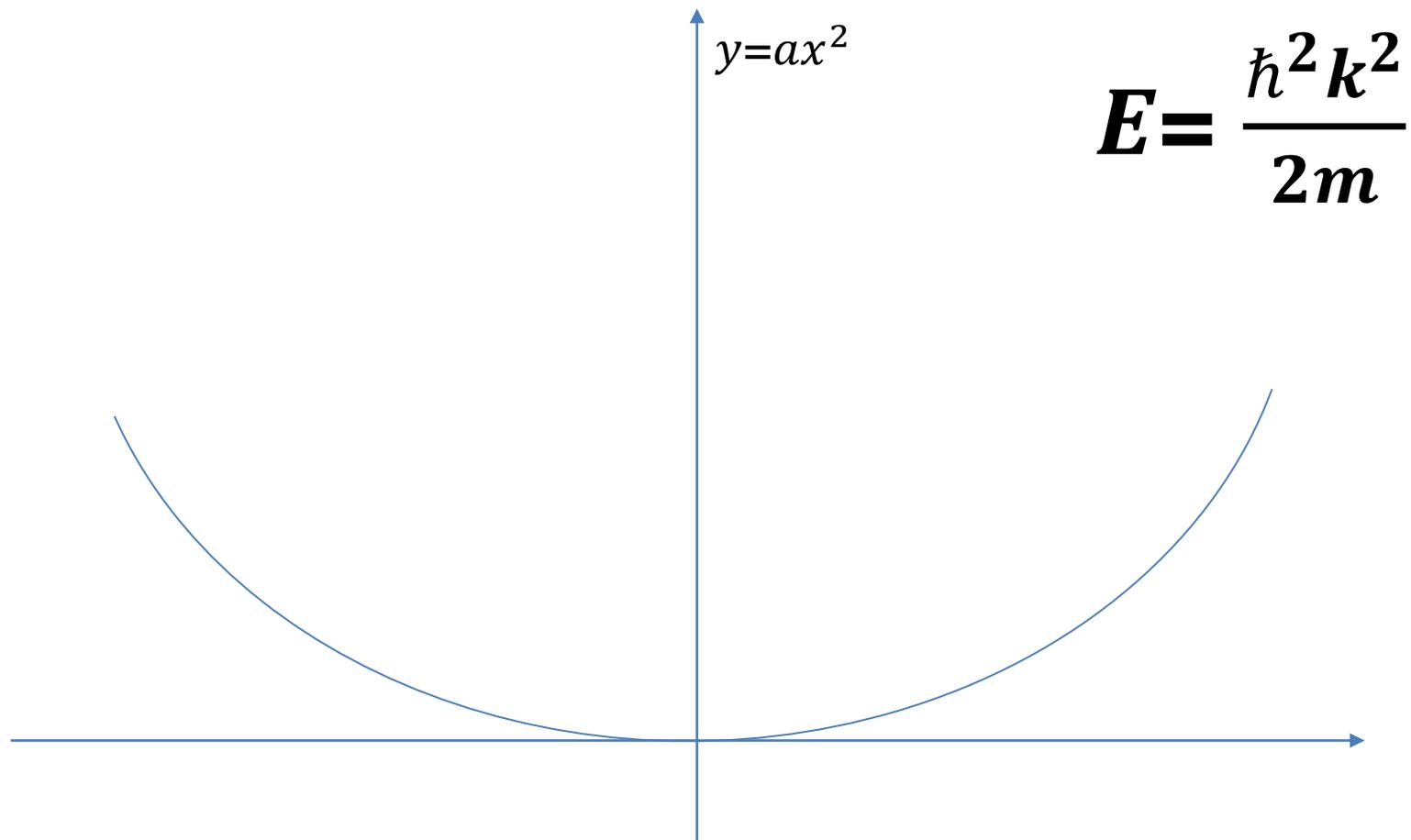


$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = \gamma = \frac{\hbar^2}{m^*}$$

$$m^* = \hbar^2 \left( \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)^{-1}$$

# ある質問に対する解答：

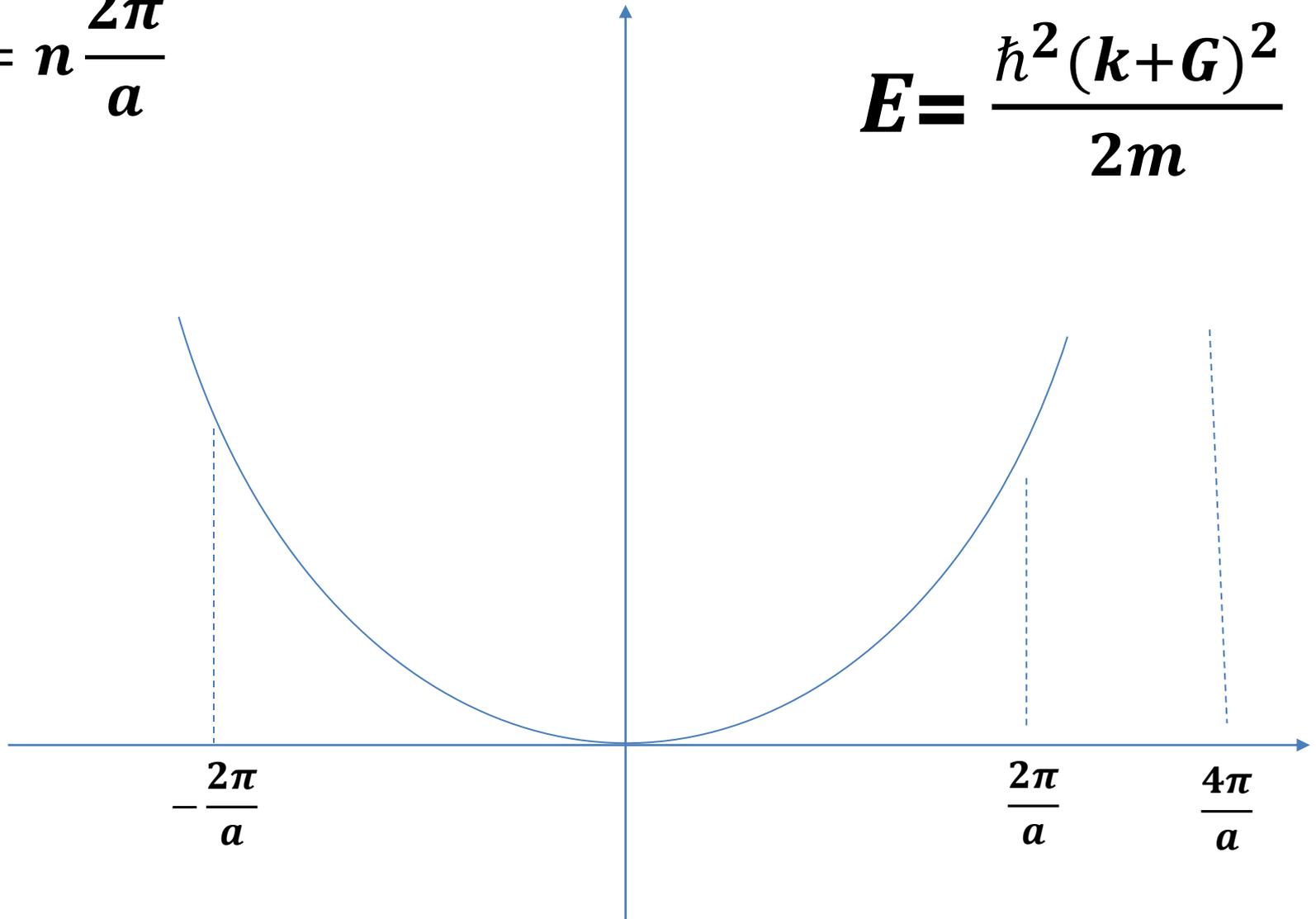


自由電子のエネルギー曲線

# ある質問に対する解答：

$$G = n \frac{2\pi}{a}$$

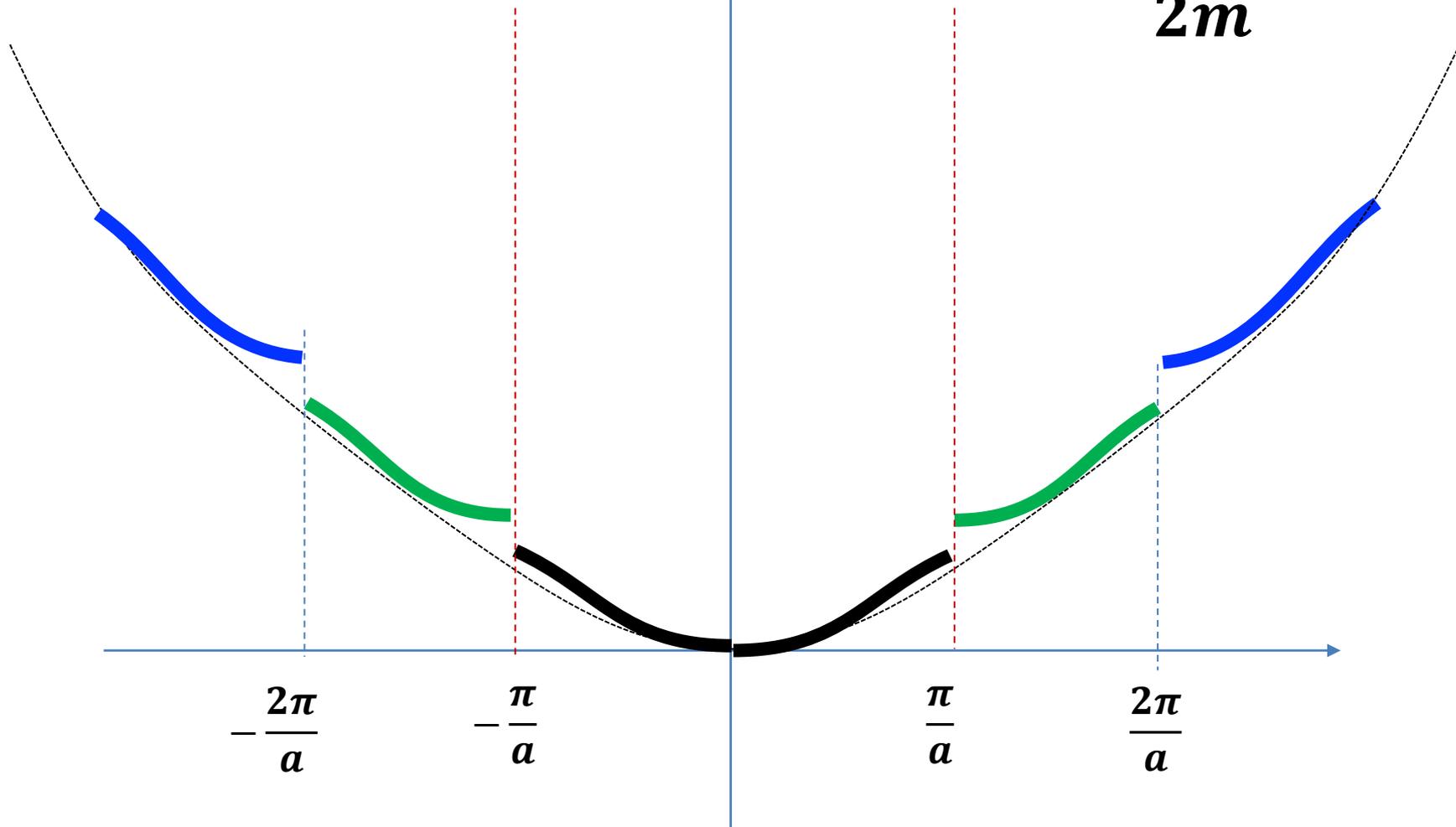
$$E = \frac{\hbar^2 (k+G)^2}{2m}$$



# ある質問に対する解答：

$$G = n \frac{2\pi}{a}$$

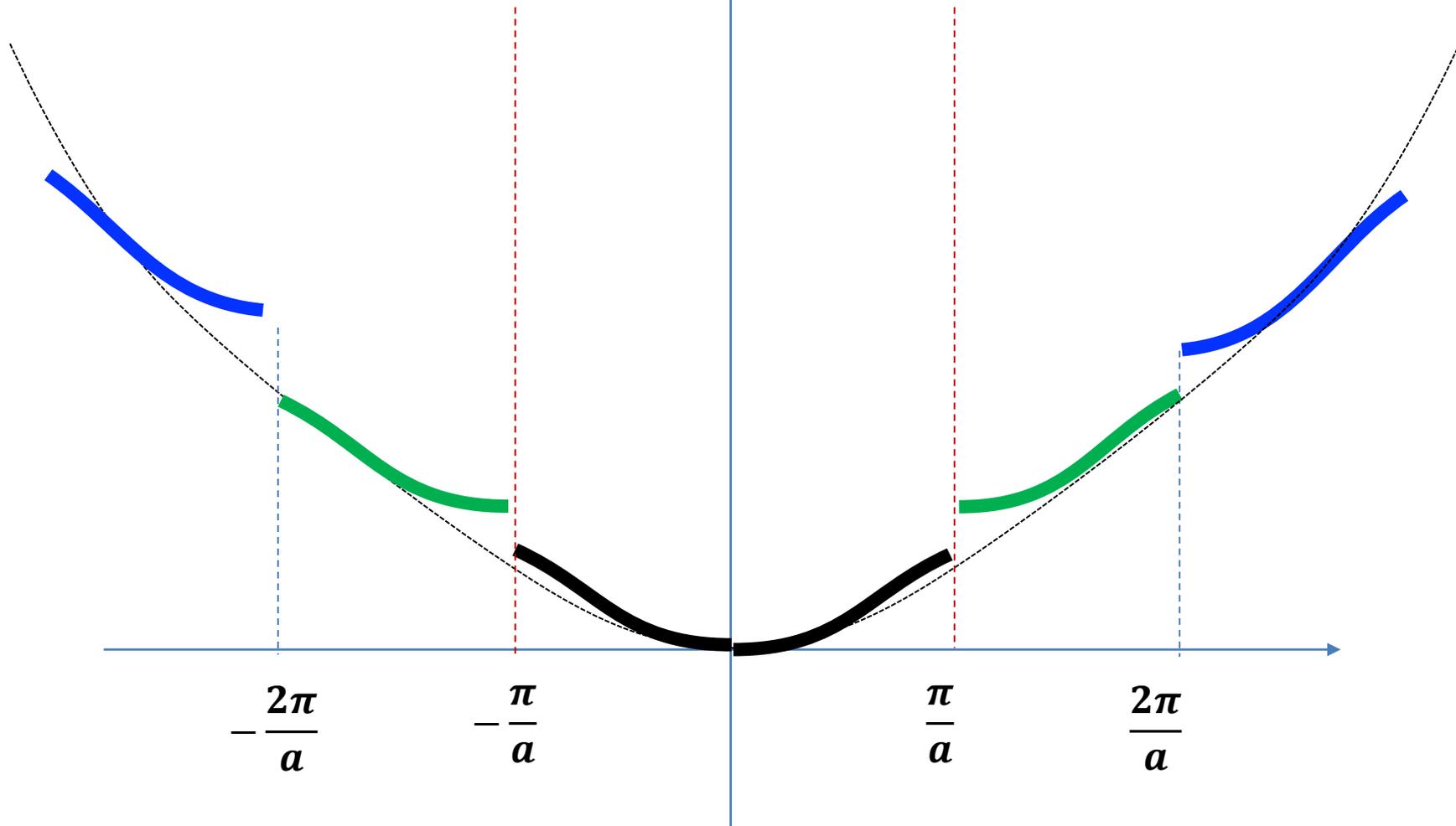
$$E = \frac{\hbar^2 (k+G)^2}{2m}$$



# ある質問に対する解答：

$$G = n \frac{2\pi}{a}$$

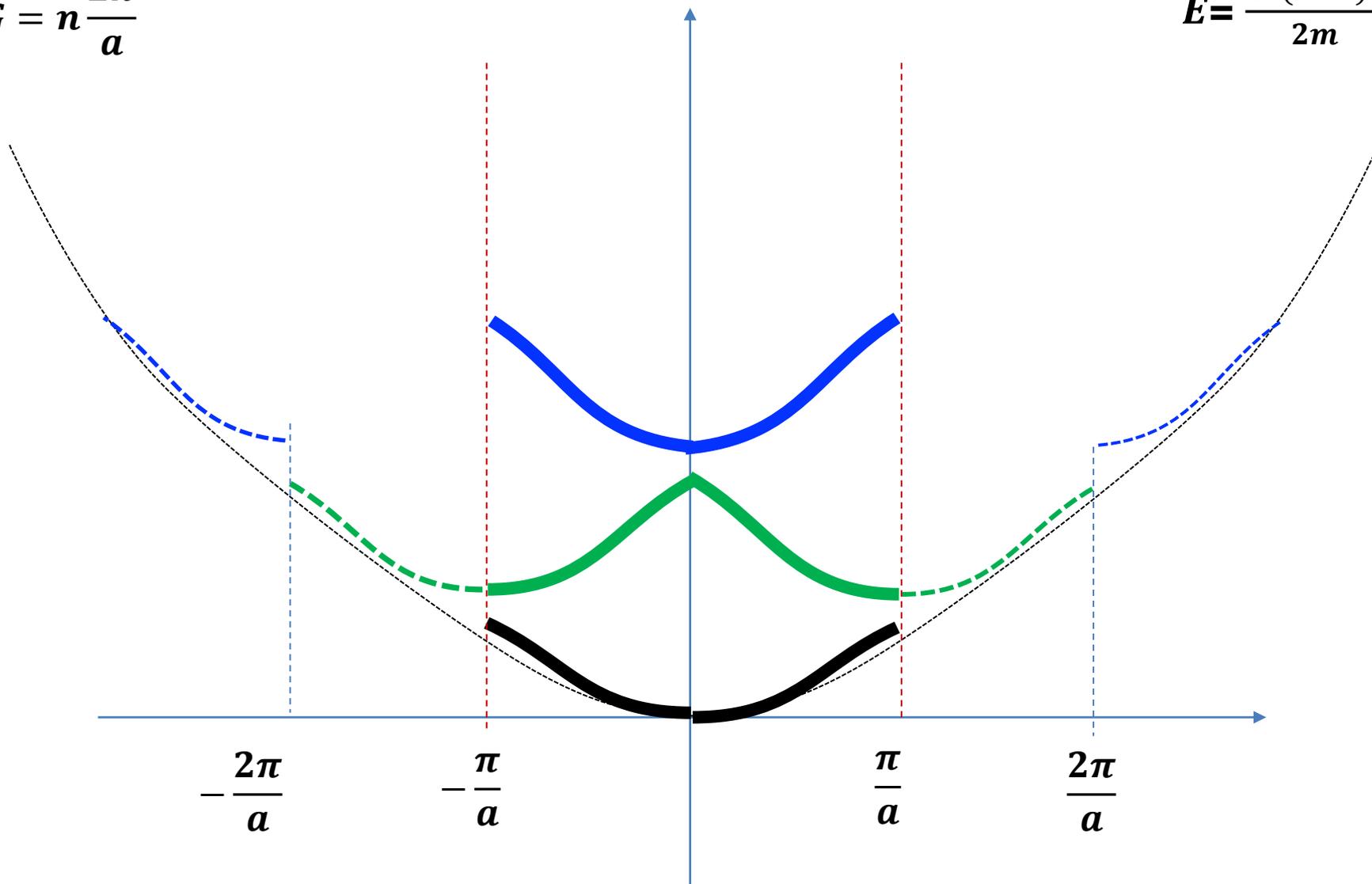
$$E = \frac{\hbar^2 (k+G)^2}{2m}$$



# ある質問に対する解答：

$$G = n \frac{2\pi}{a}$$

$$E = \frac{\hbar^2 (k+G)^2}{2m}$$



# 固体におけるバンド構造:

$$H_{ij} = \delta_{ij} \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} + \int V(x) e^{k_i - k_j} dx = E \delta_{ij}$$

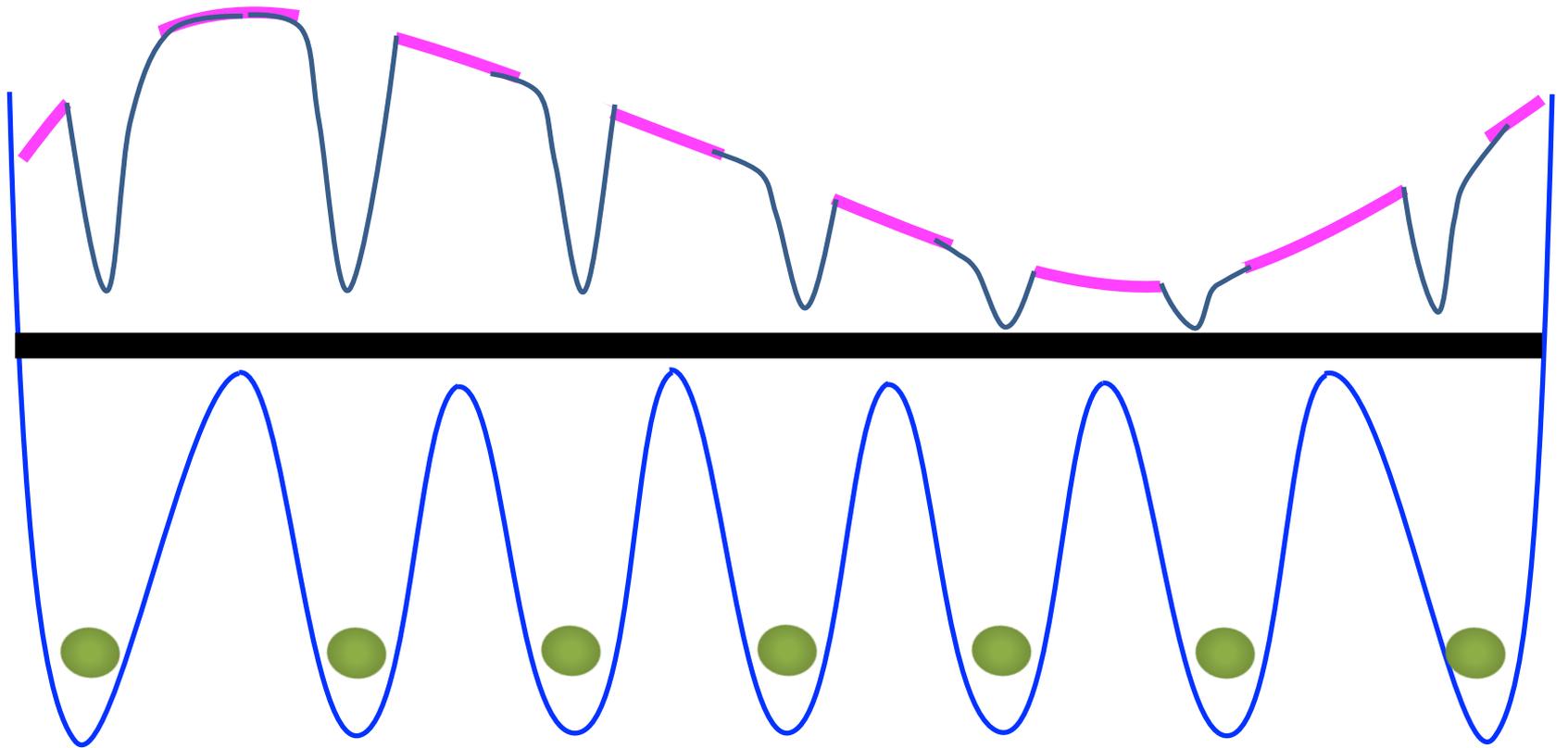
$$\int V(x) e^{k_i - k_j} dx = V_{Si}(G) \cos(G \cdot d)$$

$$G^2 = 3 \quad V_{Si}(G) = -0.21$$

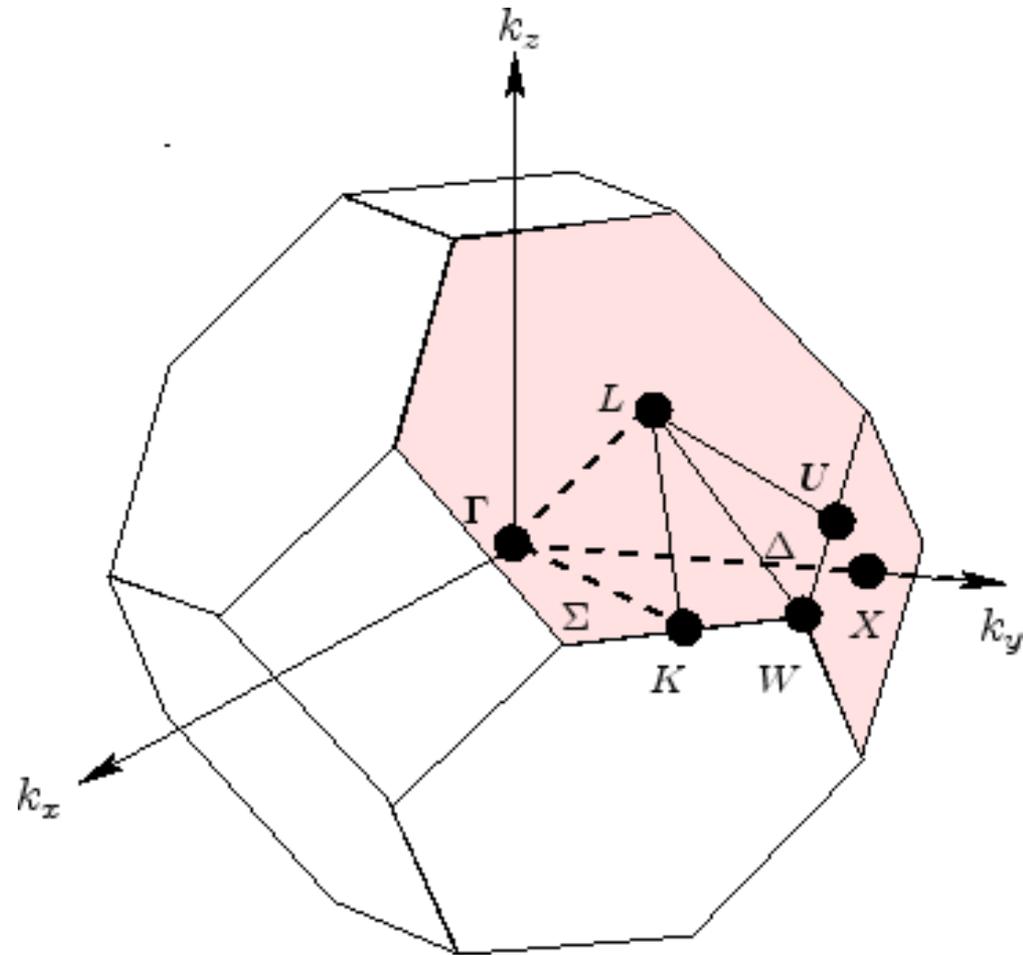
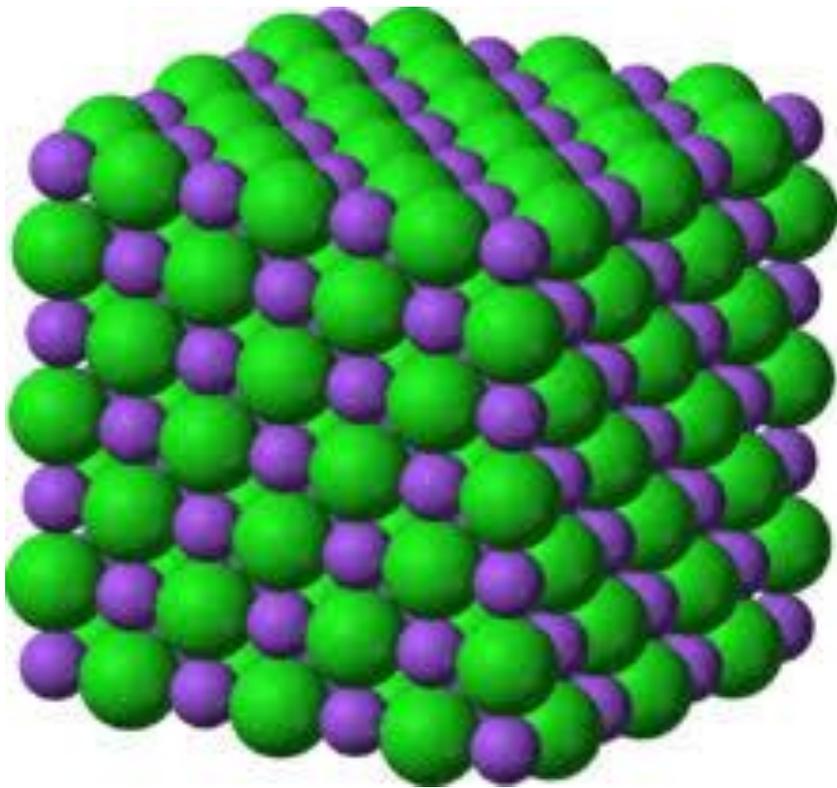
$$G^2 = 8 \quad V_{Si}(G) = 0.04$$

$$G^2 = 11 \quad V_{Si}(G) = 0.08$$

# 擬ポテンシャル法: (DFT常用手法)



# 結晶構造：結晶格子とその逆格子



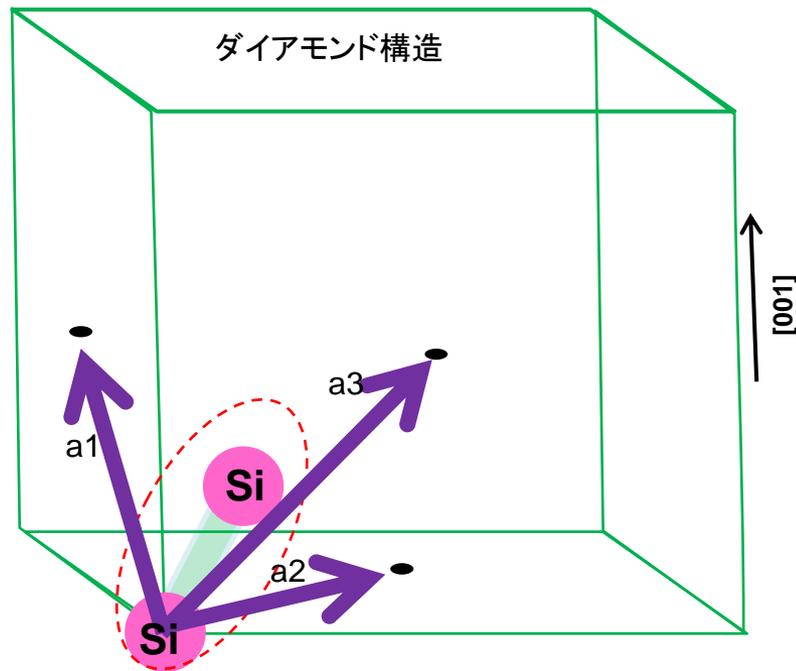
# 固体における周期構造の表現

## 結晶格子 + 基本単位格子

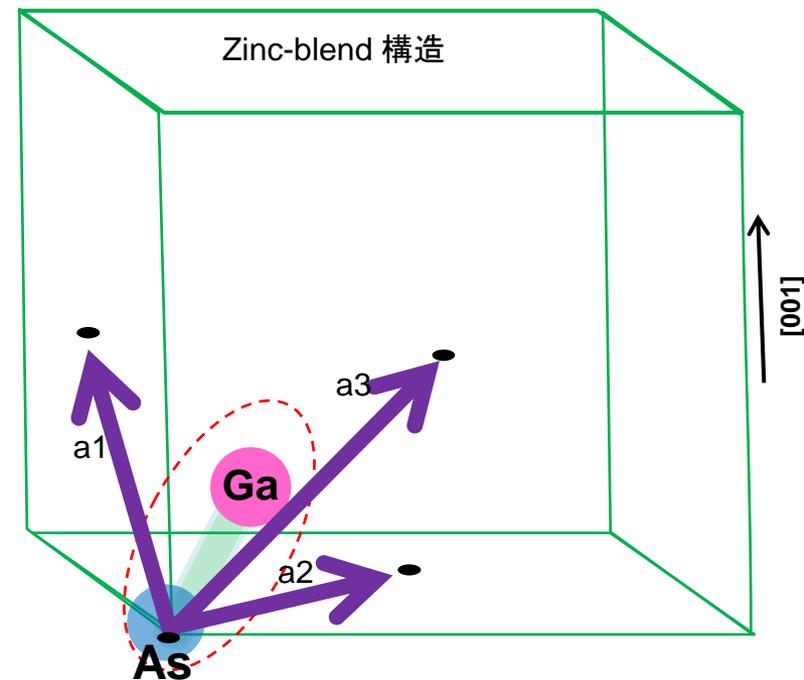
$G$ : 面心立方逆格子

$d$ :  $(0, 0, 0)$ ,  $(0.125, 0.125, 0.125)$

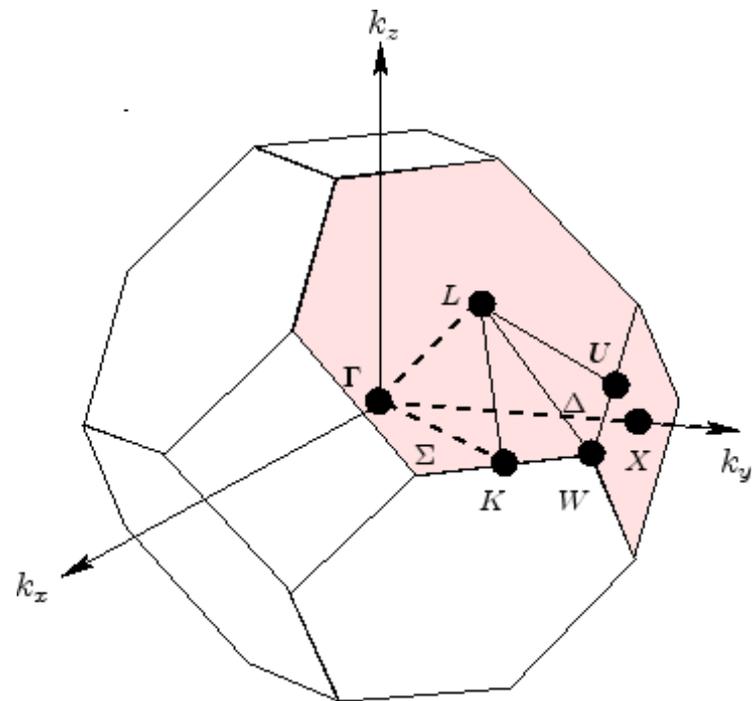
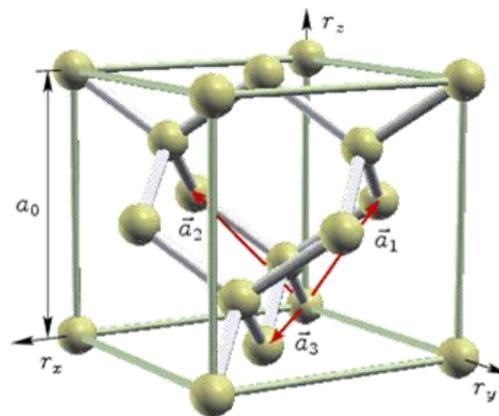
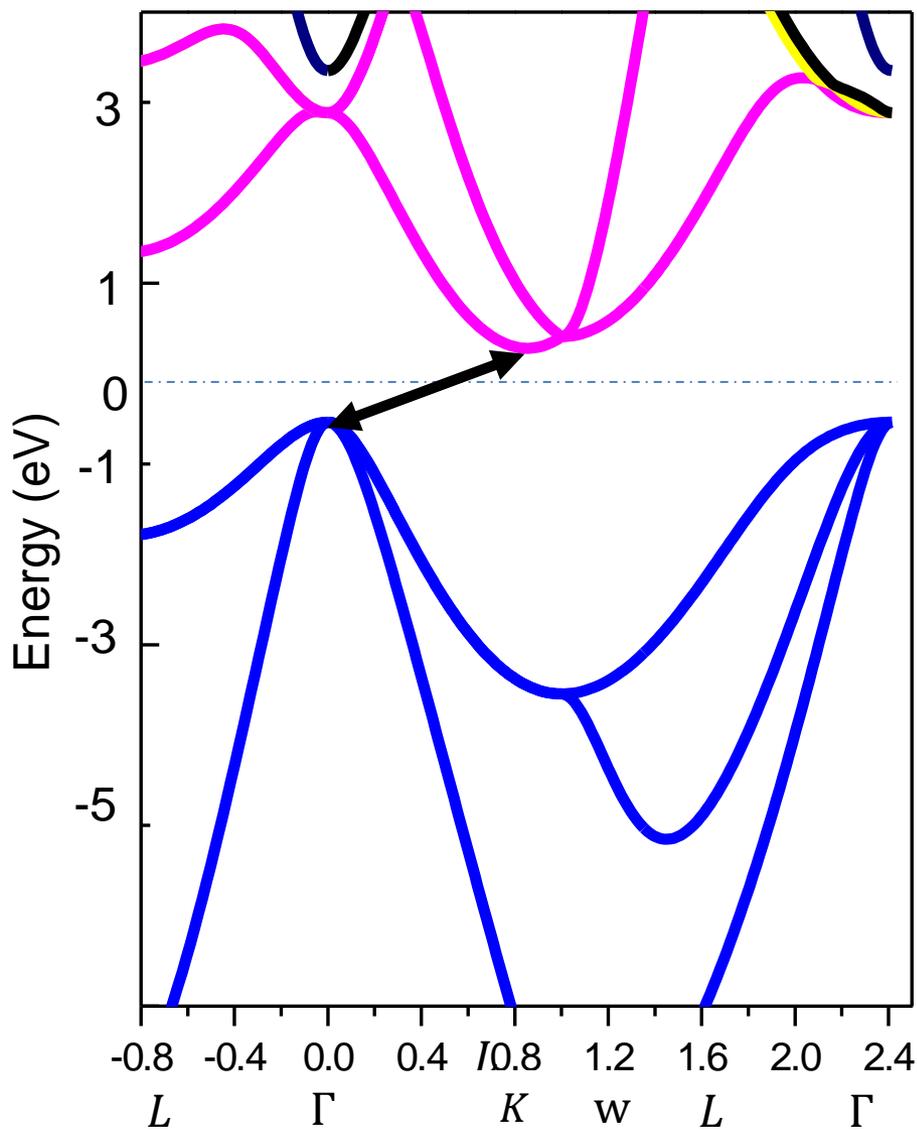
### Si



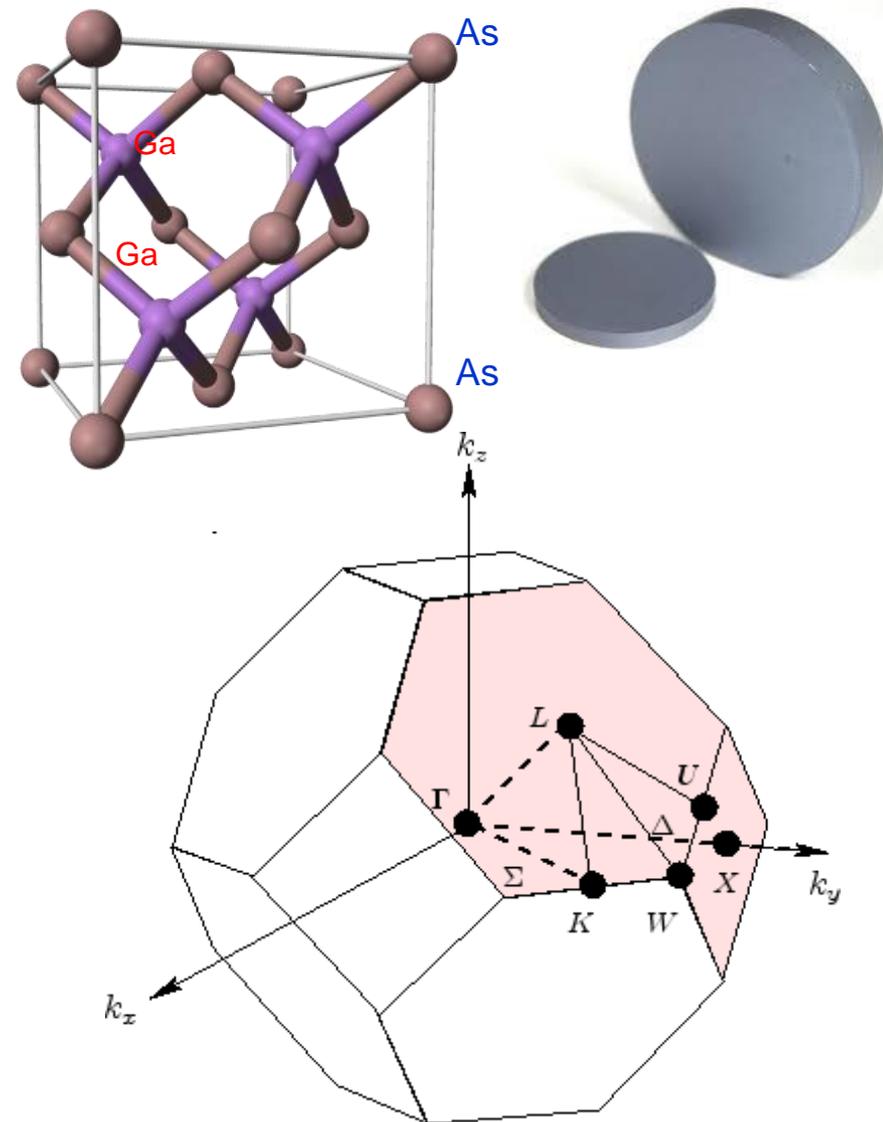
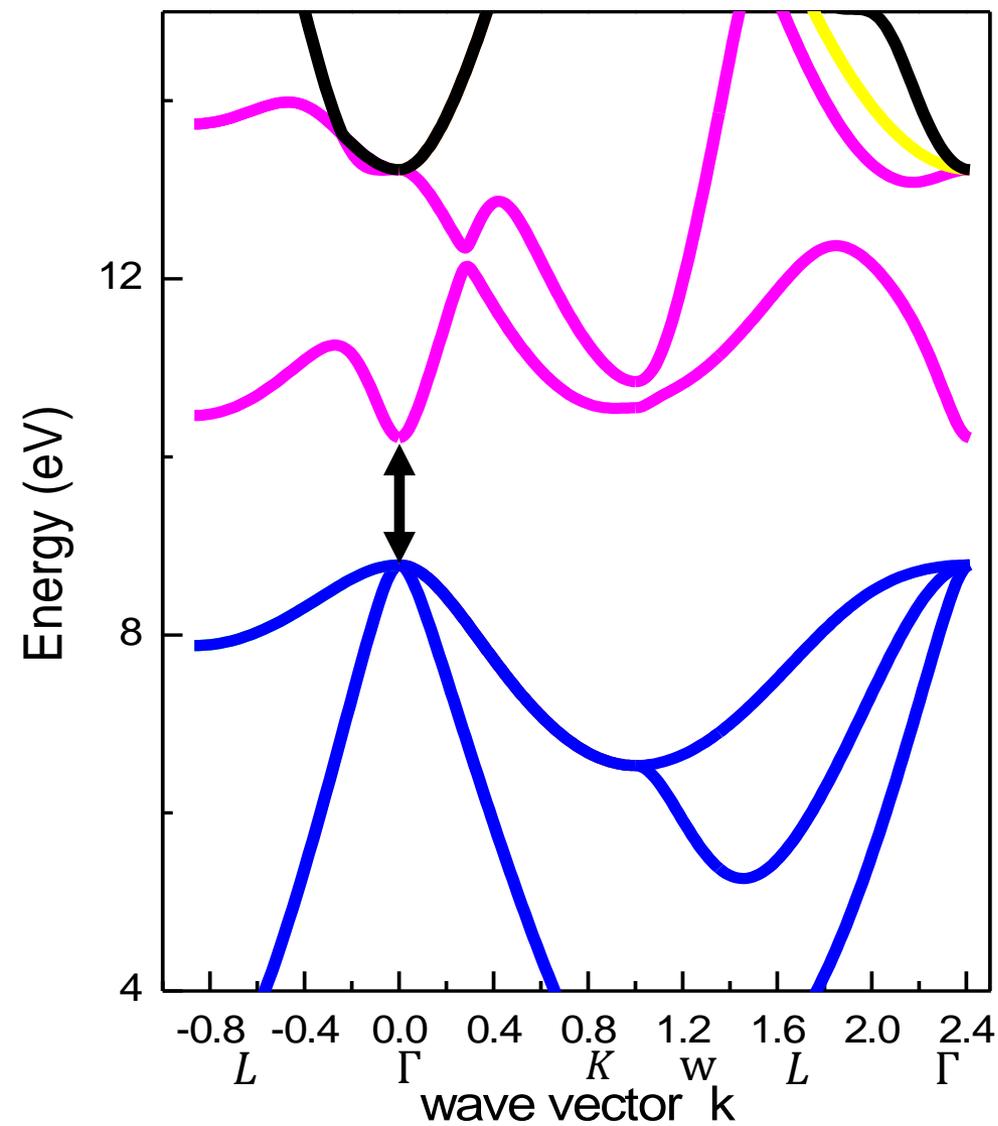
### GaAs



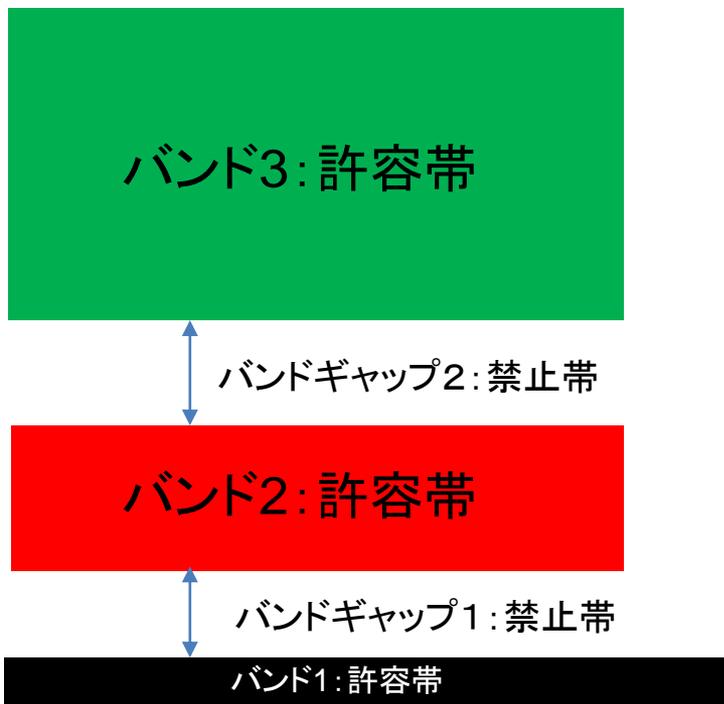
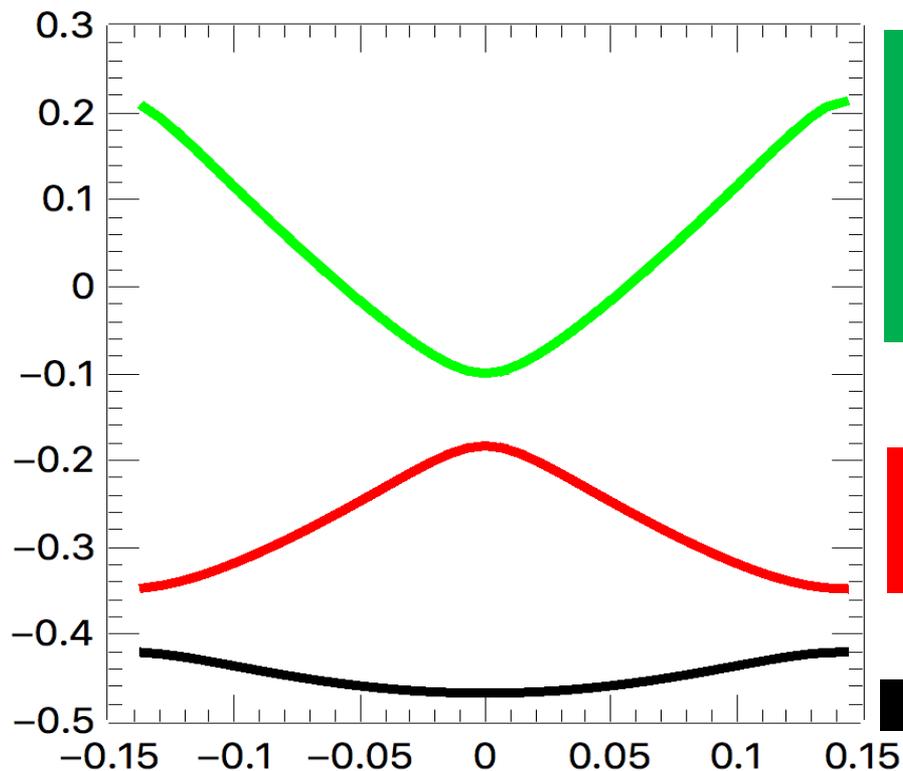
# 擬ポテンシャル法で計算したSiのバンド構造



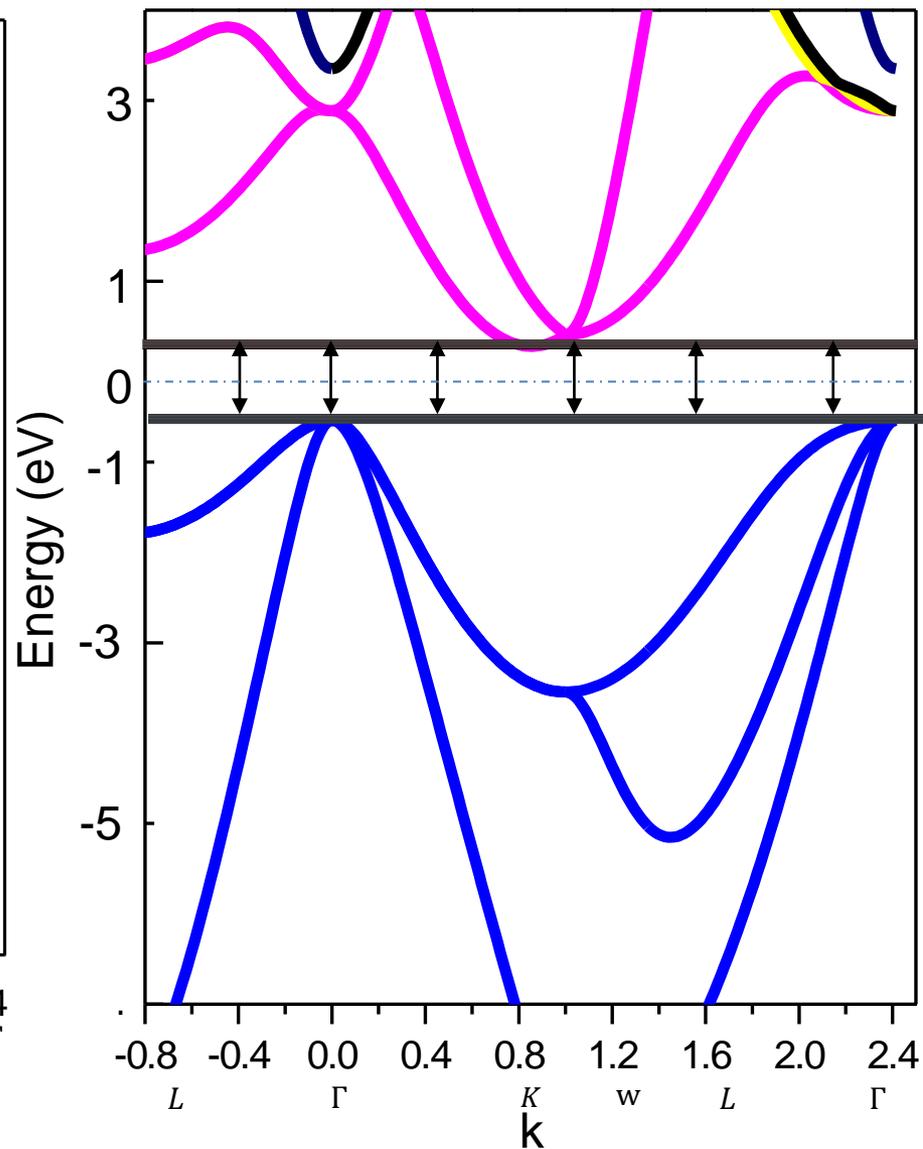
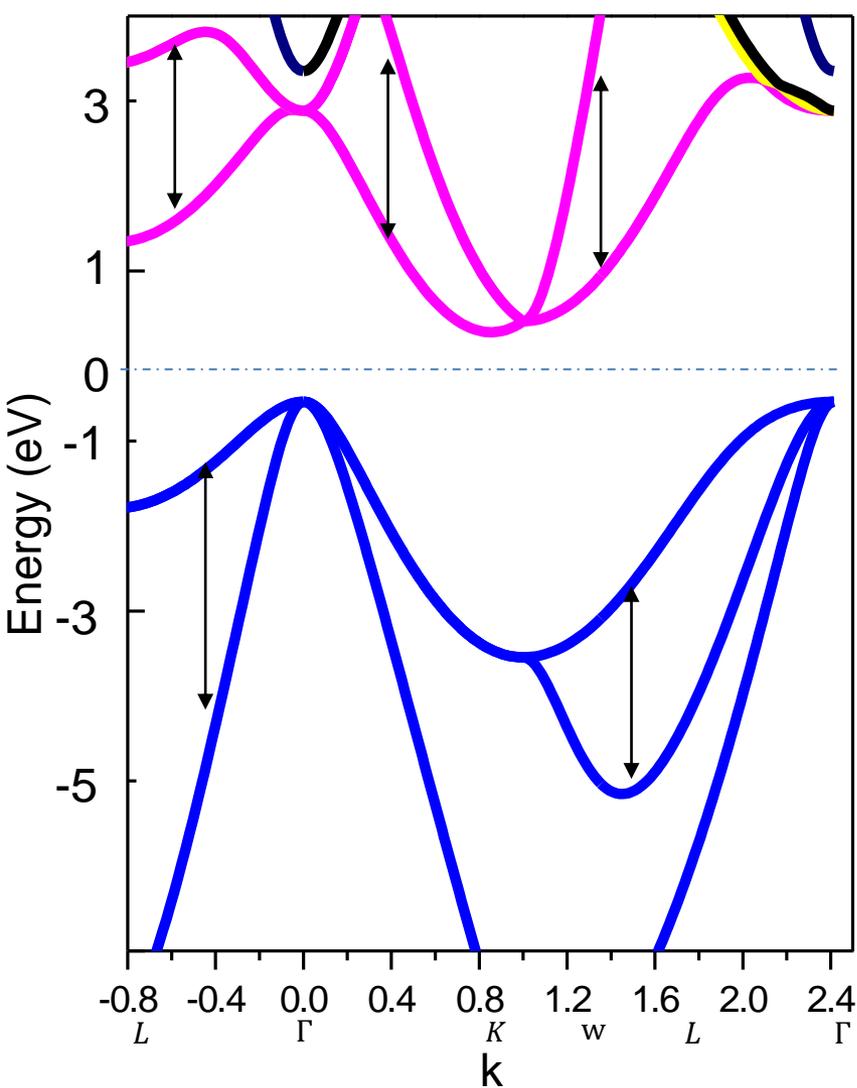
# 擬ポテンシャル法で計算したGaAsのバンド構造



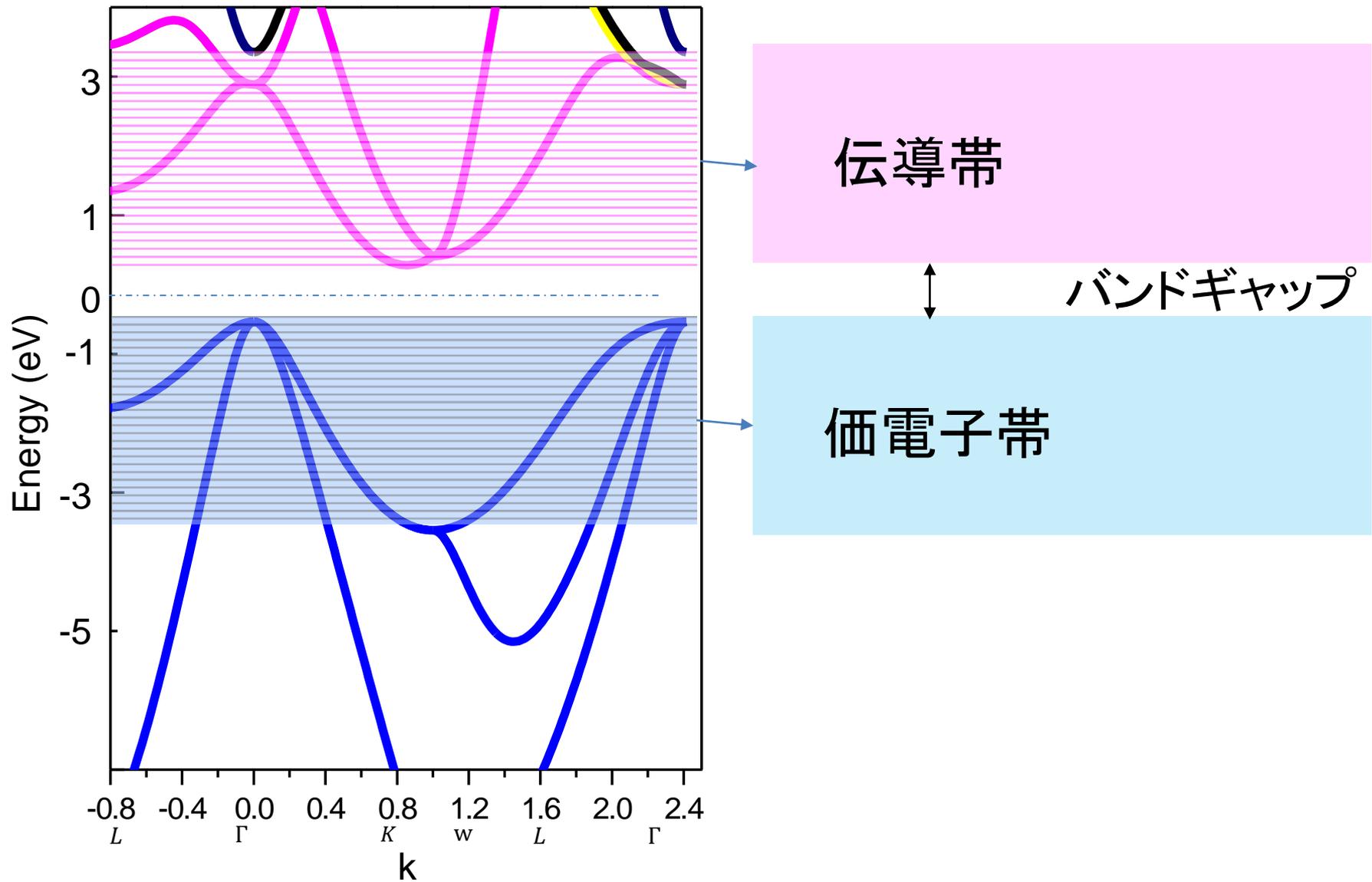
# 1次元周期構造によるバンドとバンドギャップ：



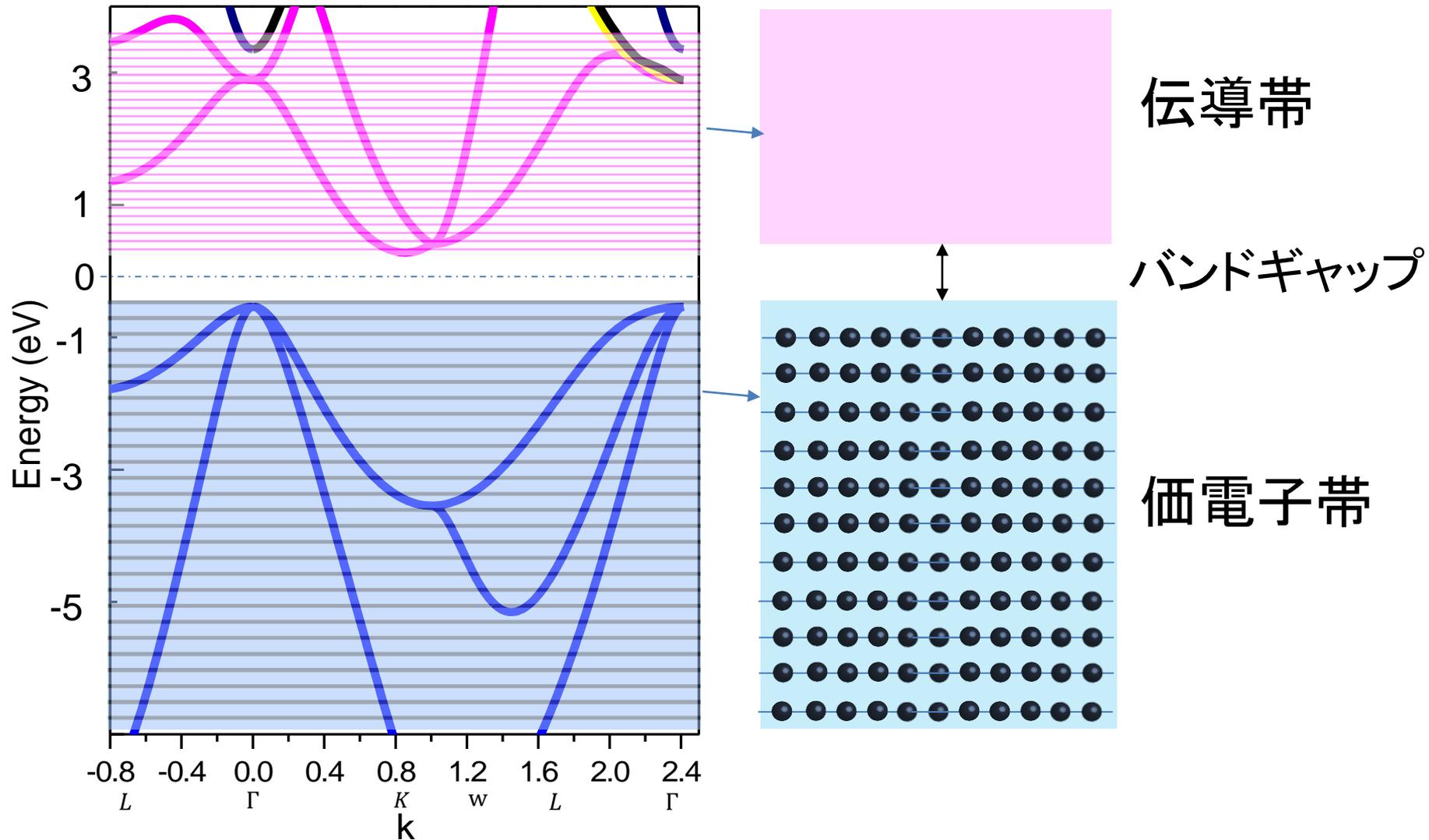
# 3次元固体におけるバンドとバンドギャップ：



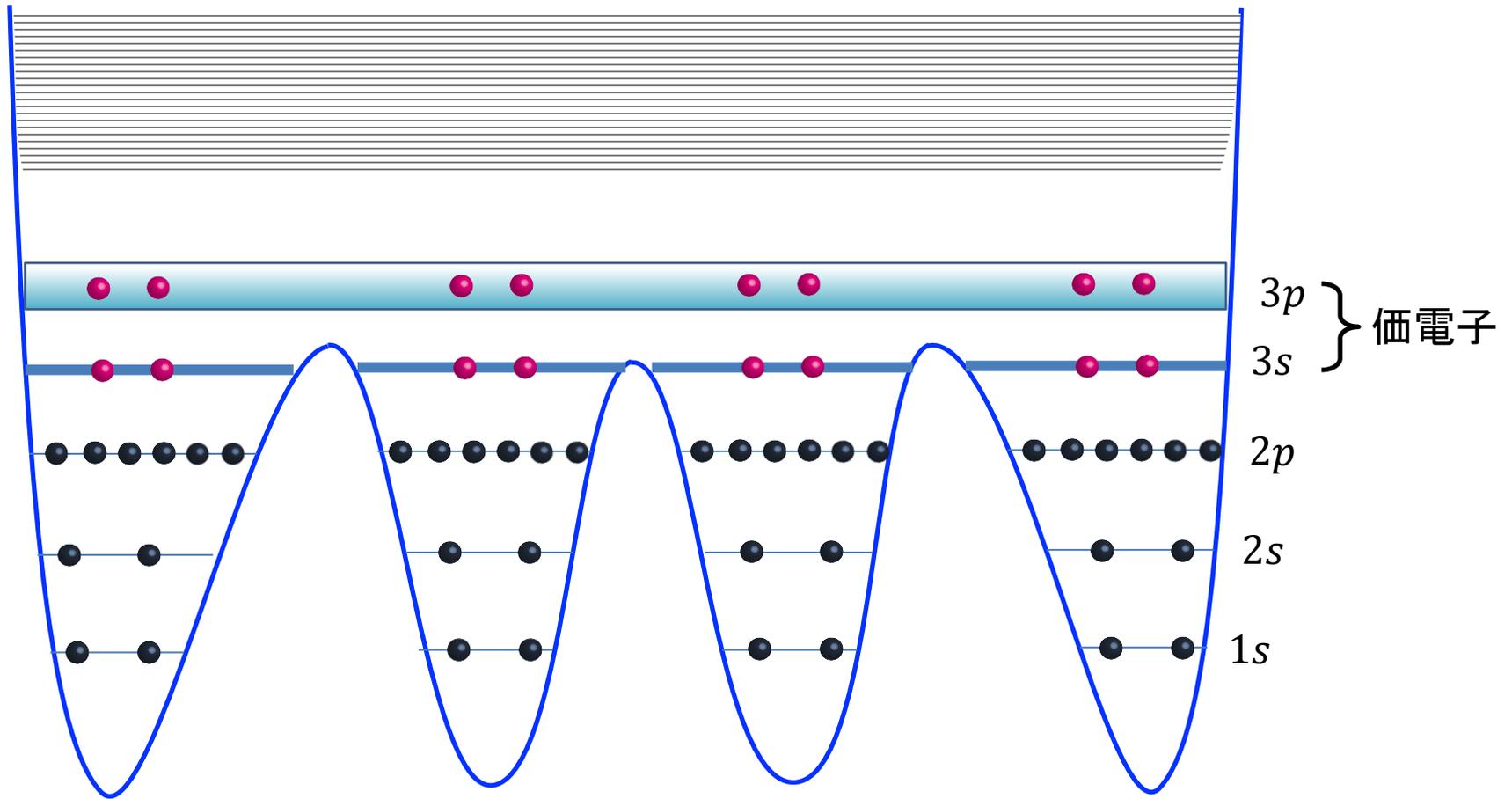
# 3次元固体における伝導帯と価電子帯：



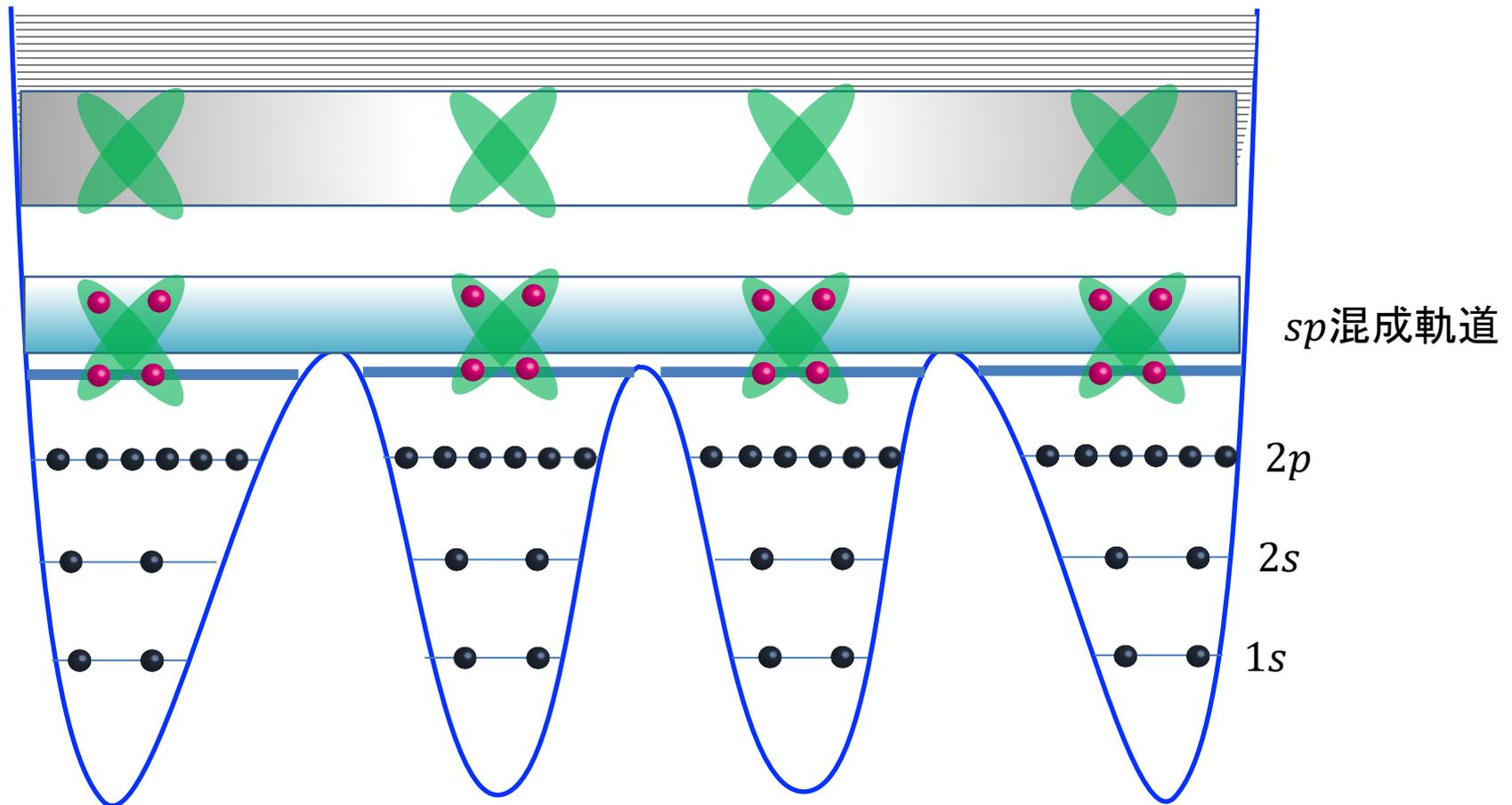
# 3次元固体における伝導帯と価電子帯：



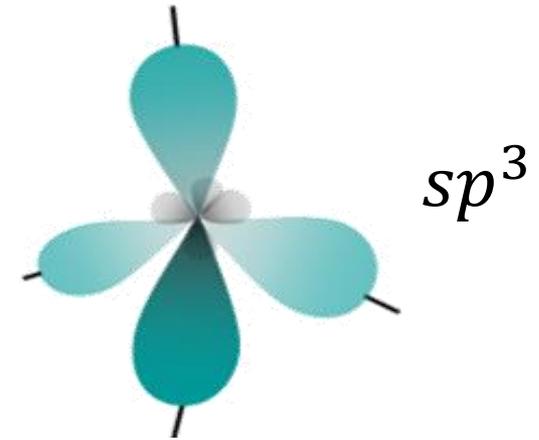
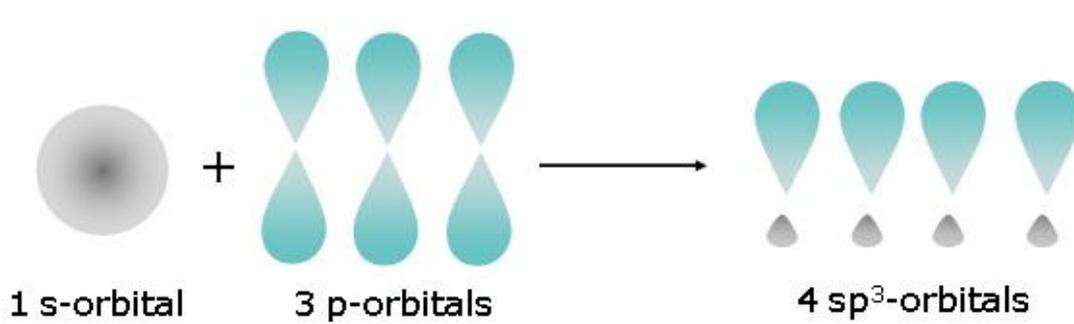
# 電子配置図：伝導帯：価電子帯 三者関係：



# 価電子による混成軌道の生成



# 価電子による混成軌道の生成

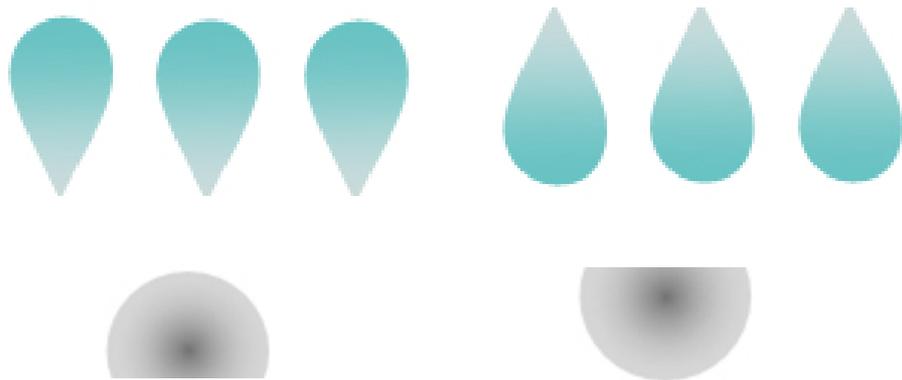
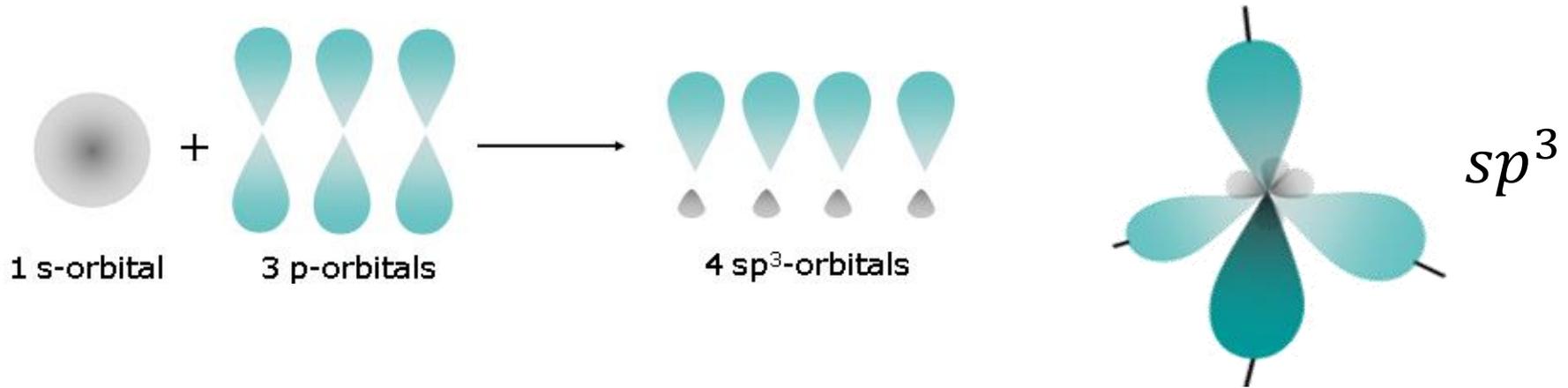


	$s$	$p_x$	$p_y$	$p_z$
$s$	$a_1$	$b$	$b$	$b$
$p_x$	$b$	$a_2$	0	0
$p_y$	$b$	0	$a_3$	0
$p_z$	$b$	0	0	$a_4$

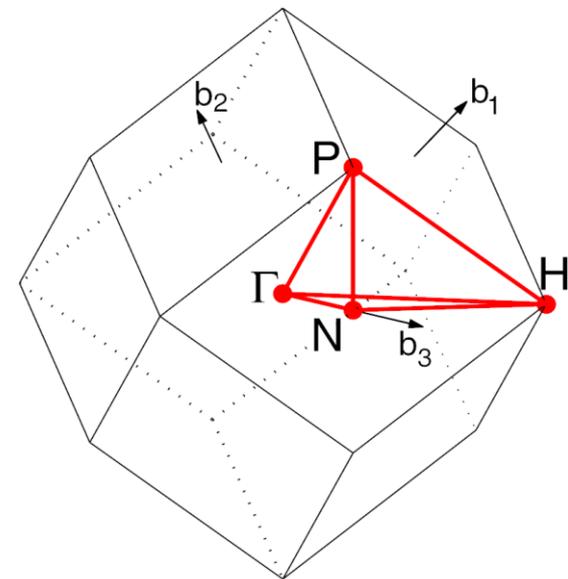
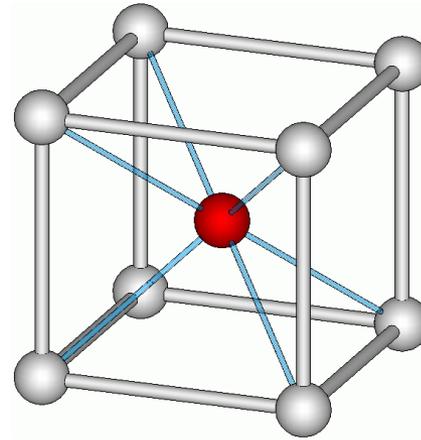
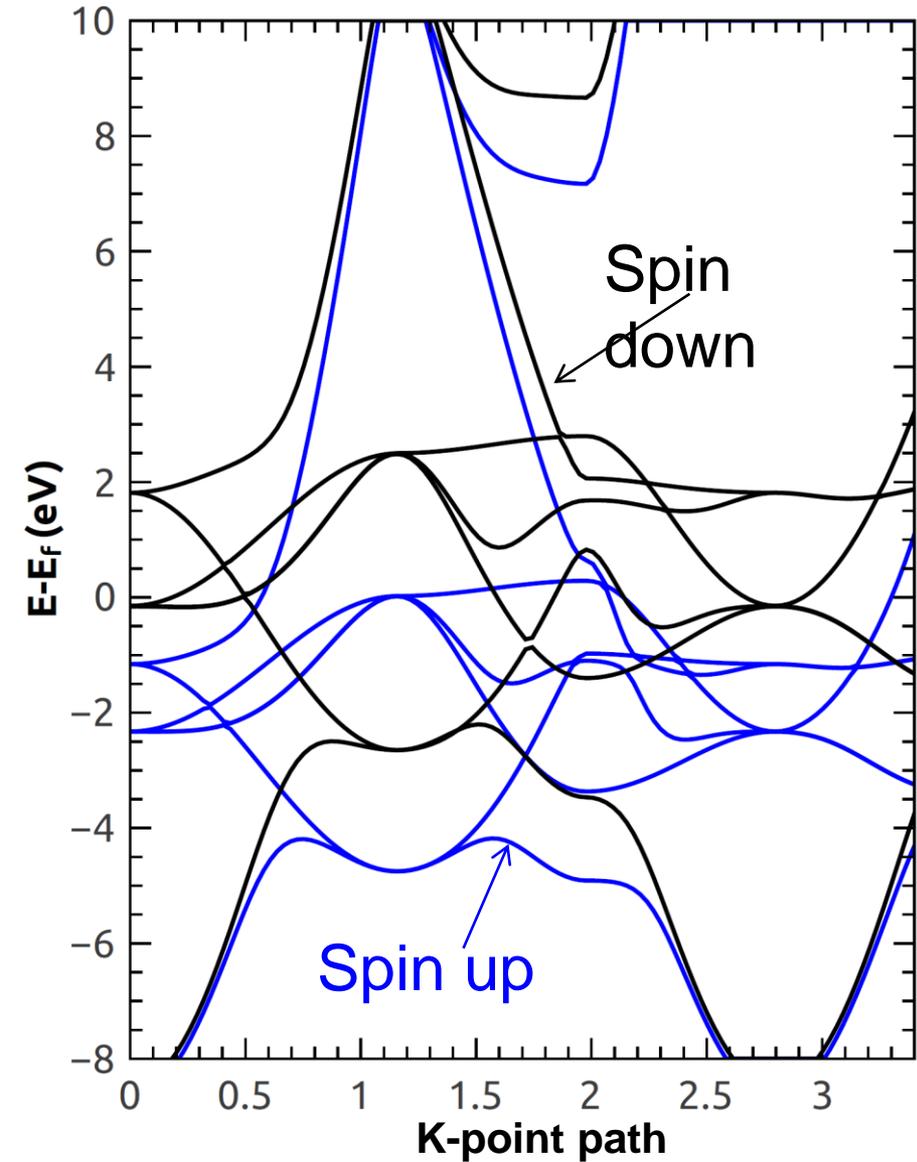
対角化

$A_1$	0	0	0
0	$A_2$	0	0
0	0	$A_3$	0
0	0	0	$A_4$

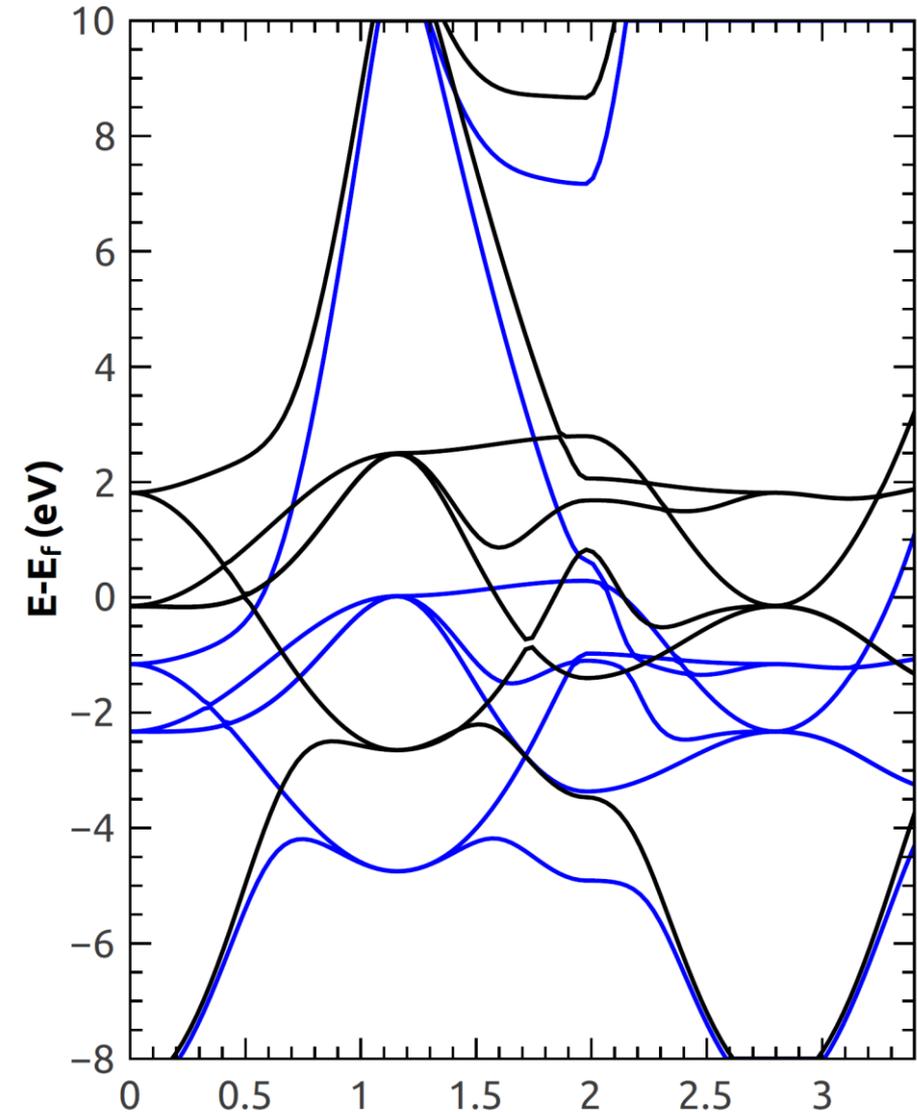
# 価電子による混成軌道の生成



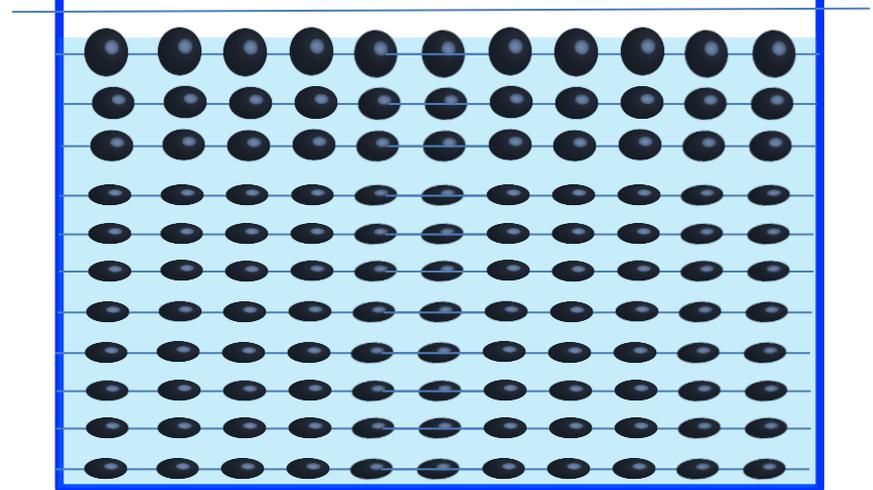
# 金属の場合



# 金属の場合は:伝導帯のみ

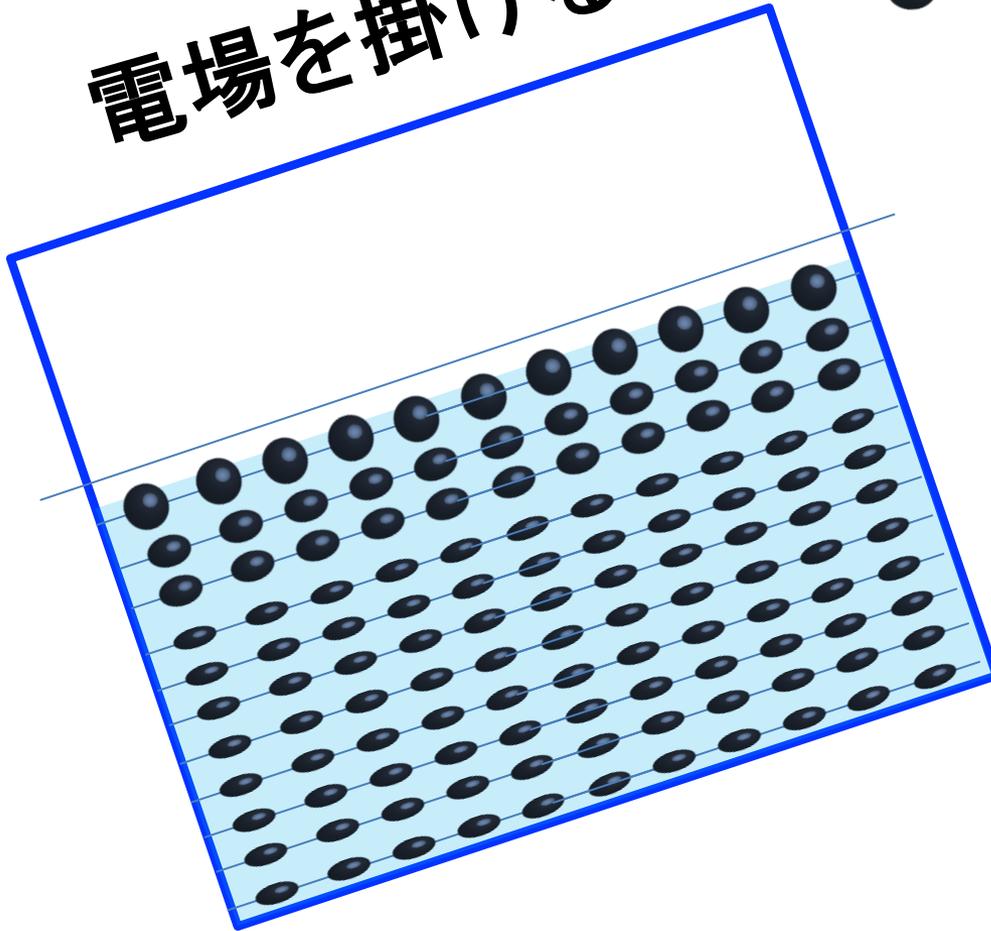


バンドギャップがない



# 金属に電場を掛けた場合：伝導性の由来

電場を掛ける



- 伝導電子(電子): キャリア

$$I = n\mu q \cdot E$$

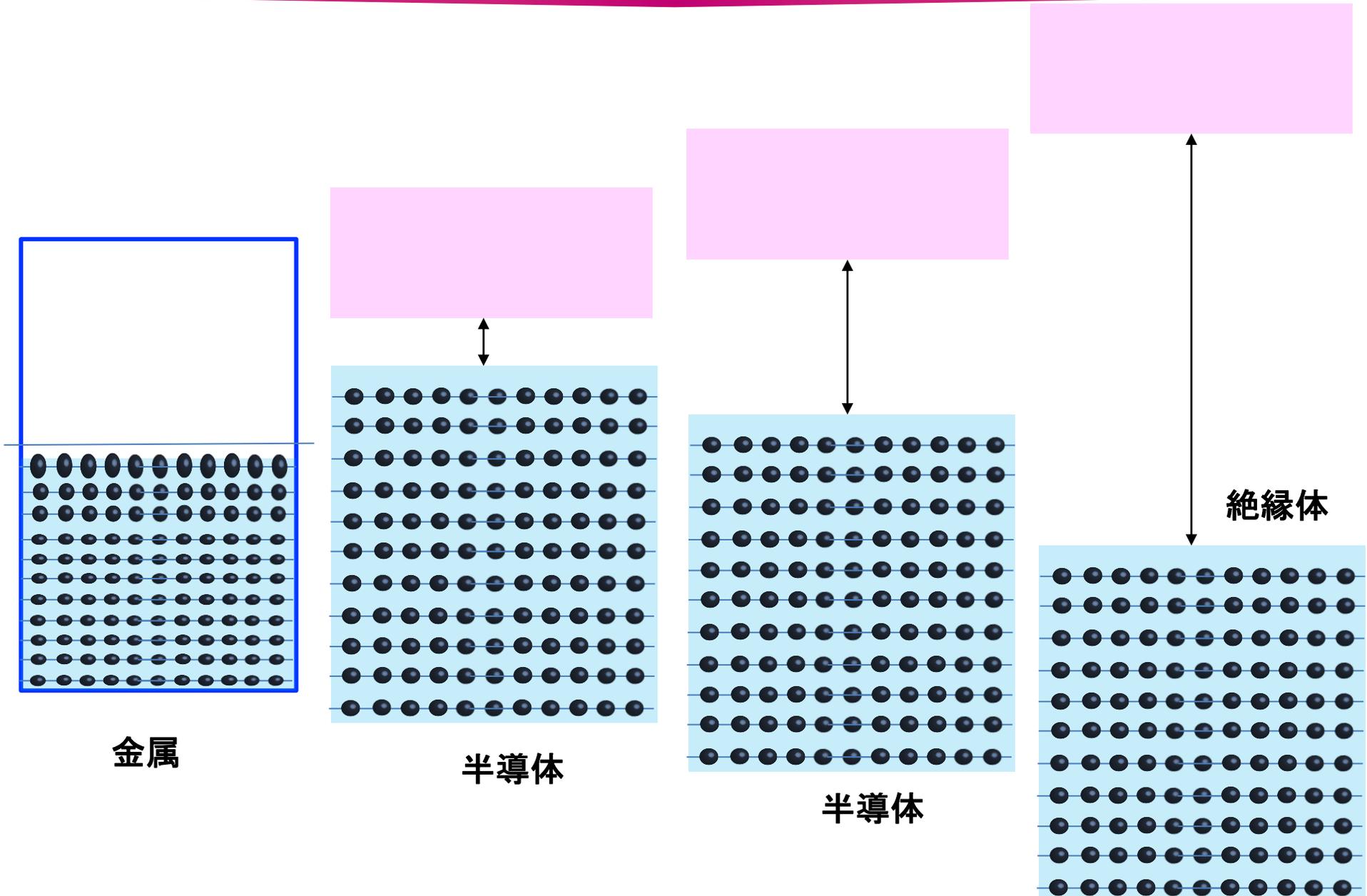
$n$  : キャリア数

$\mu$  : 移動度

$q$  : 電荷

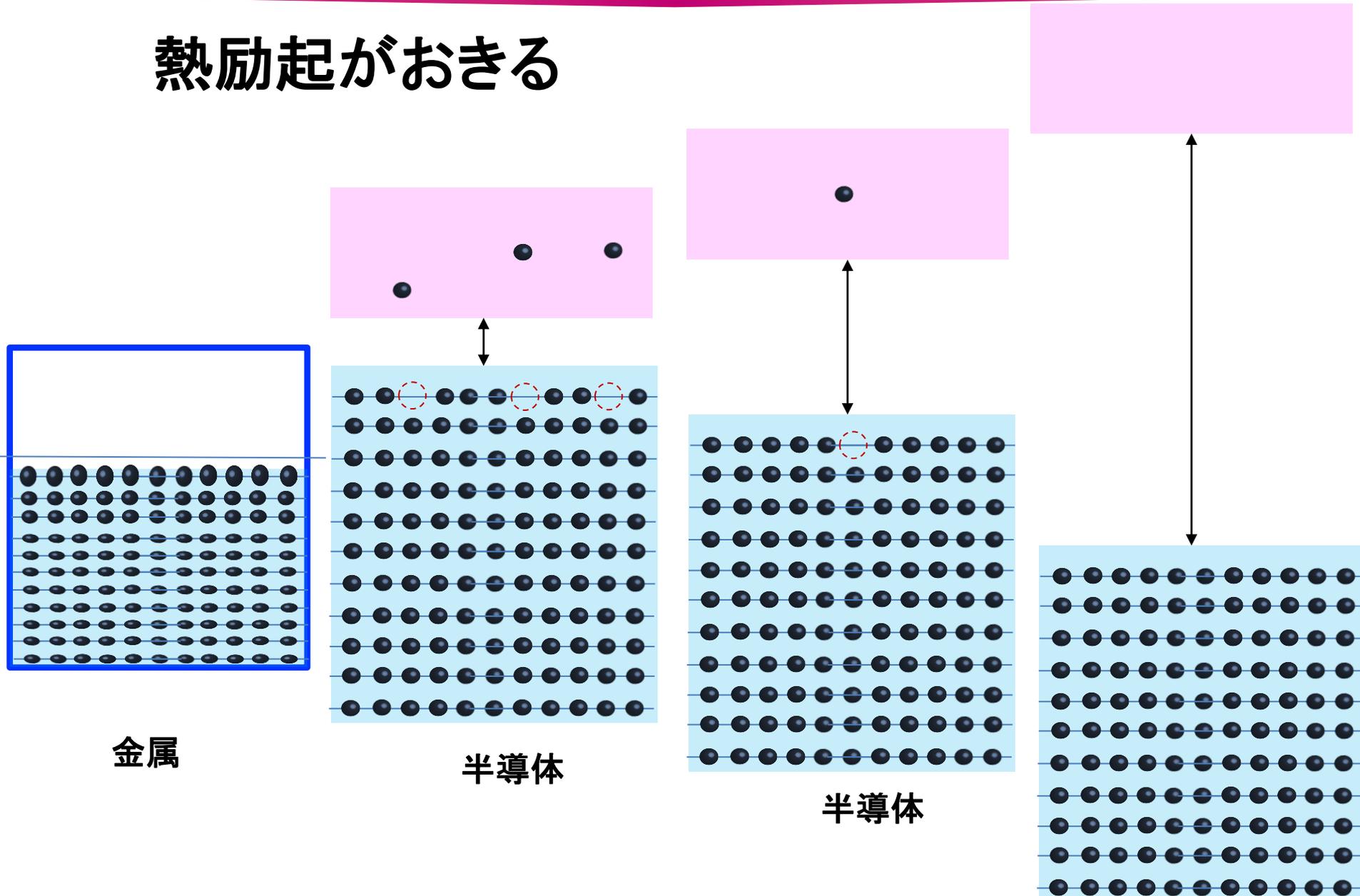
$E$  : 電場

# 温度が0Kの時:

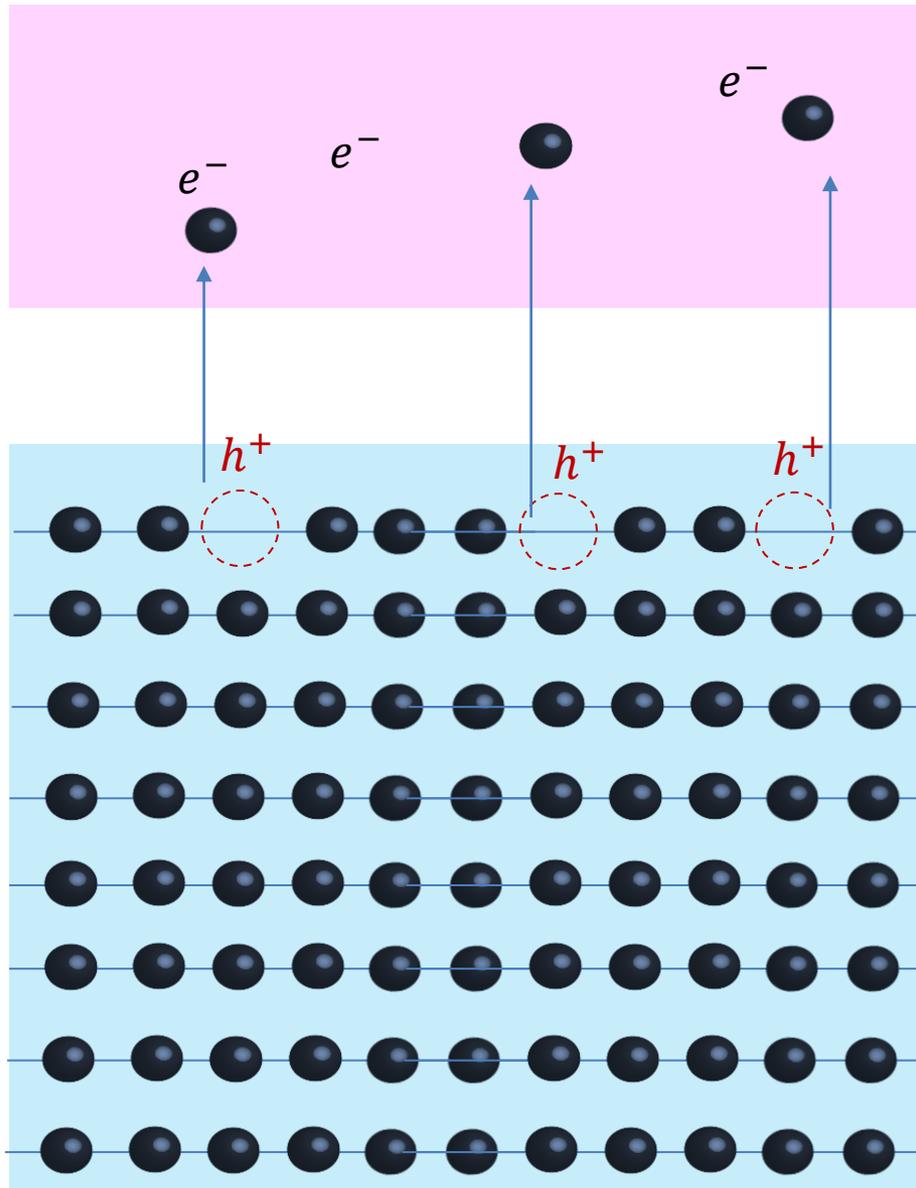


温度が  $[300\text{K} = 0.025\text{eV}]$  の時:

熱励起がおきる



# キャリア: 伝導電子と正孔(hole)



● 伝導電子(電子)

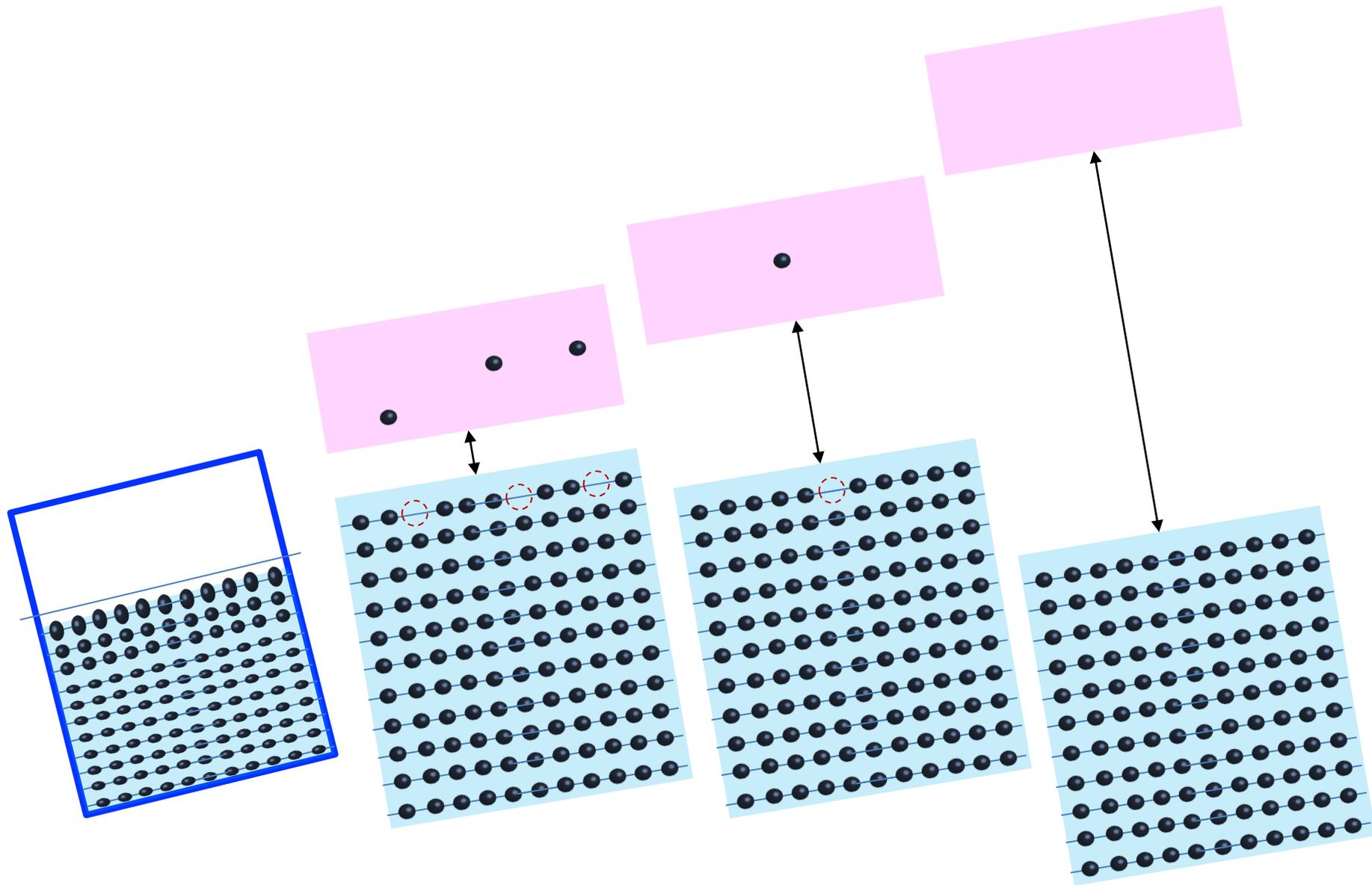
○ 伝導正孔(正孔)

電荷が正になっている理由は半導体  
がもともと中性であるから

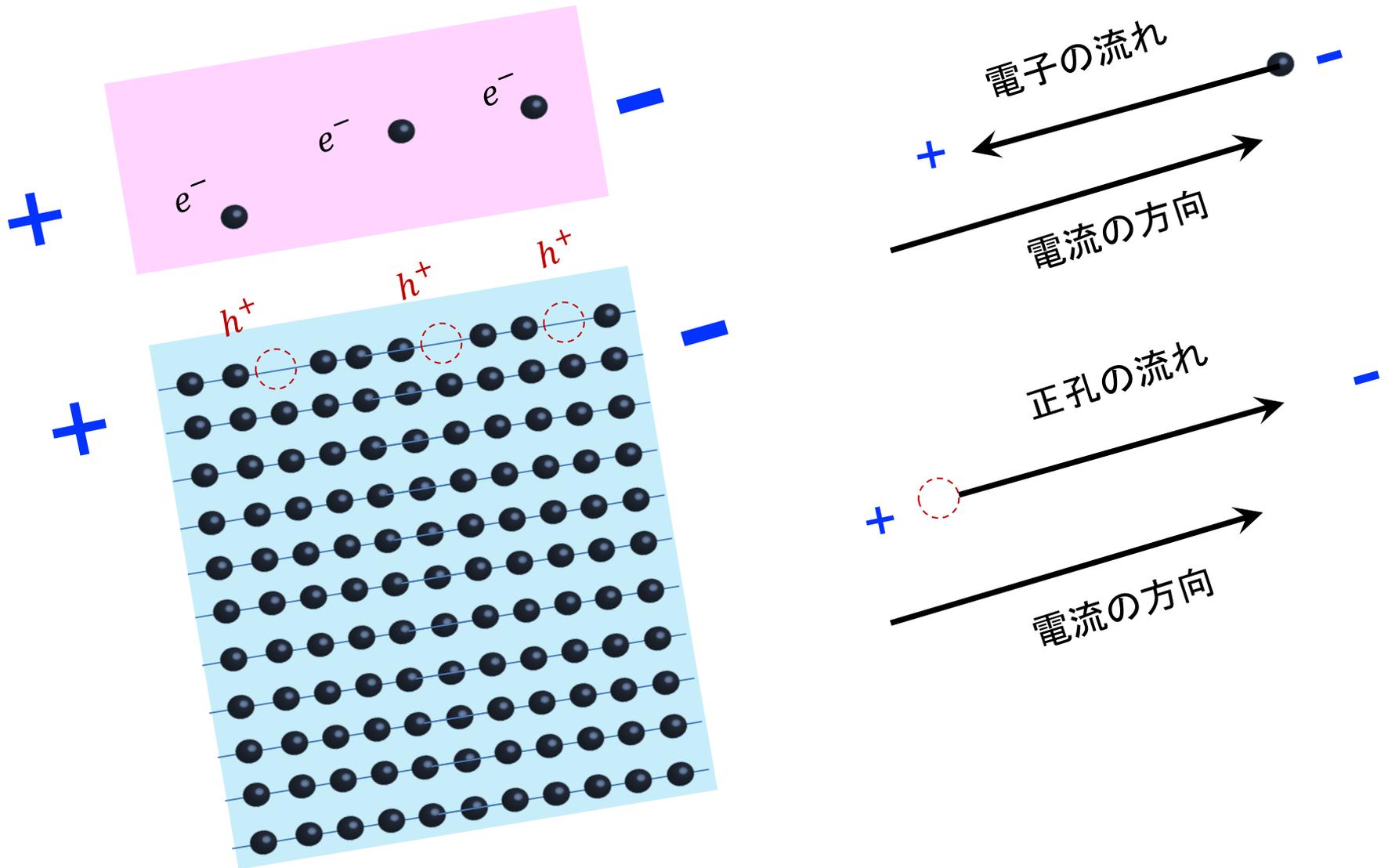
$$0 - e^- = h^+$$

$$0 - (-1) = +1$$

# 半導体に電場を掛ける

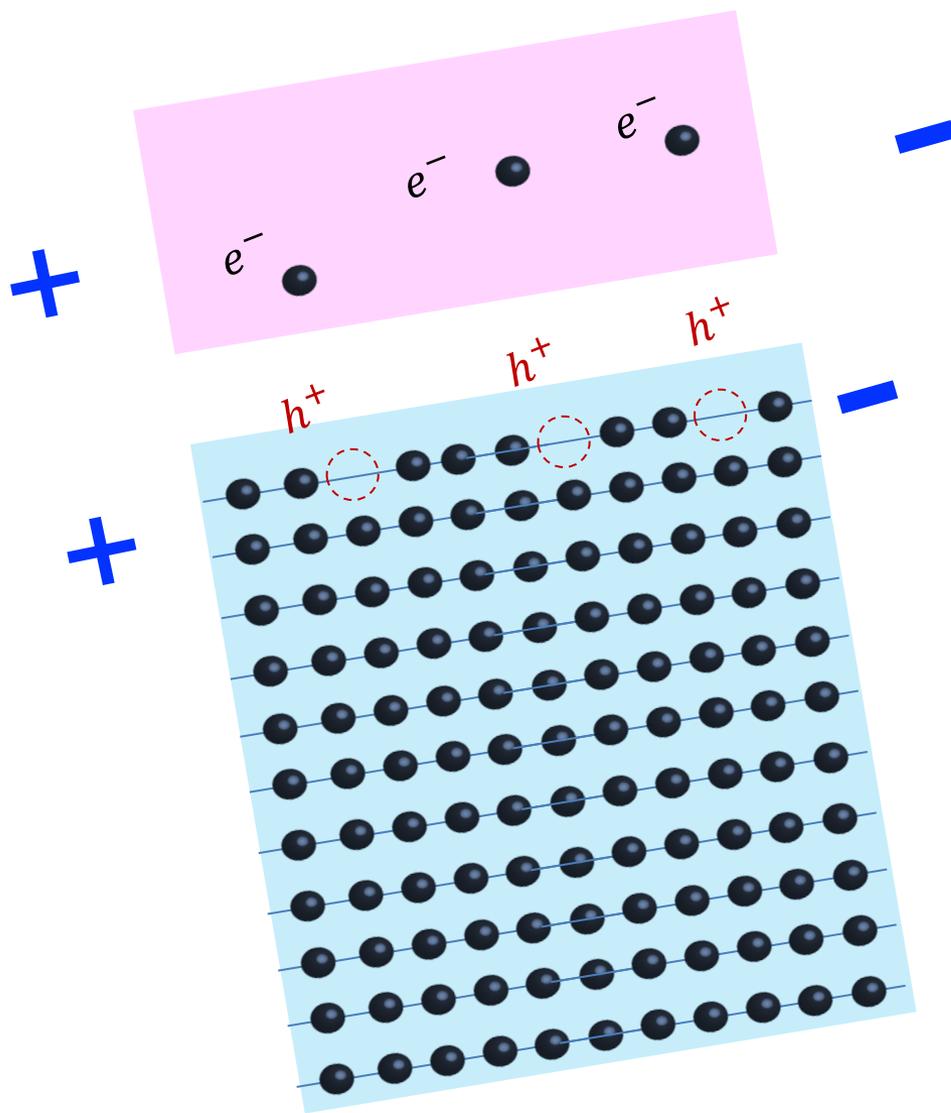


# キャリアの流れ:



# キャリアの流れによる電流の生成:

移動できるのは電子と正孔

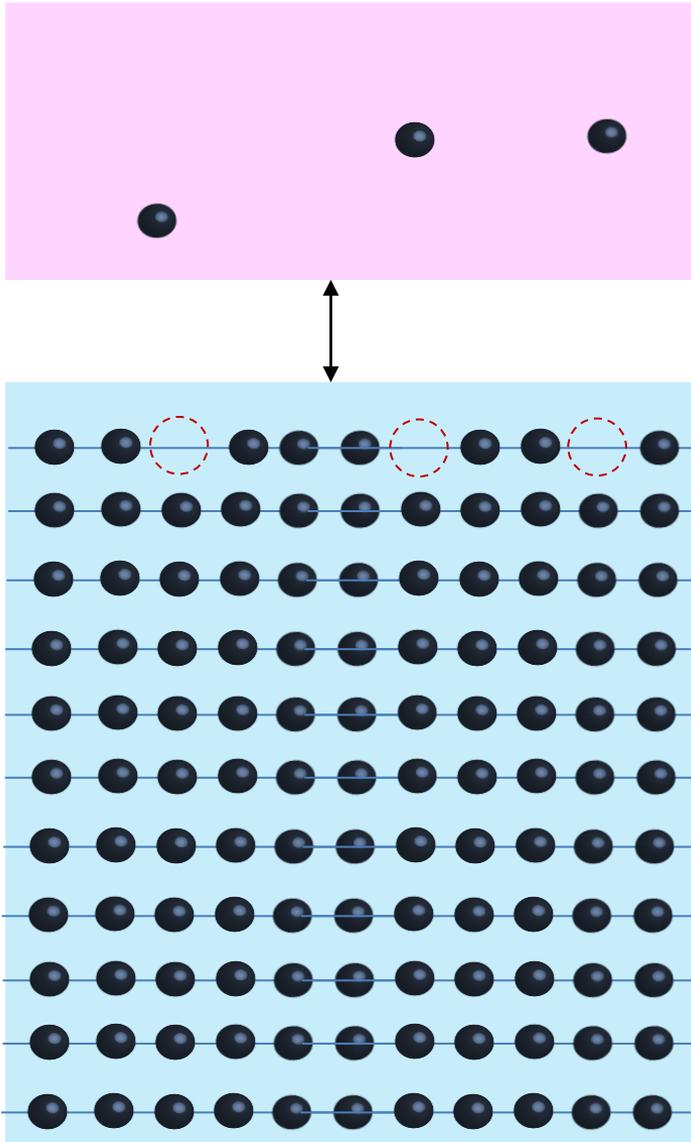


$$I_e = n_e \mu_e q \cdot E$$

$$I_h = n_h \mu_h q \cdot E$$

$$I = I_e + I_h$$

# 半導体の伝導性が弱い原因

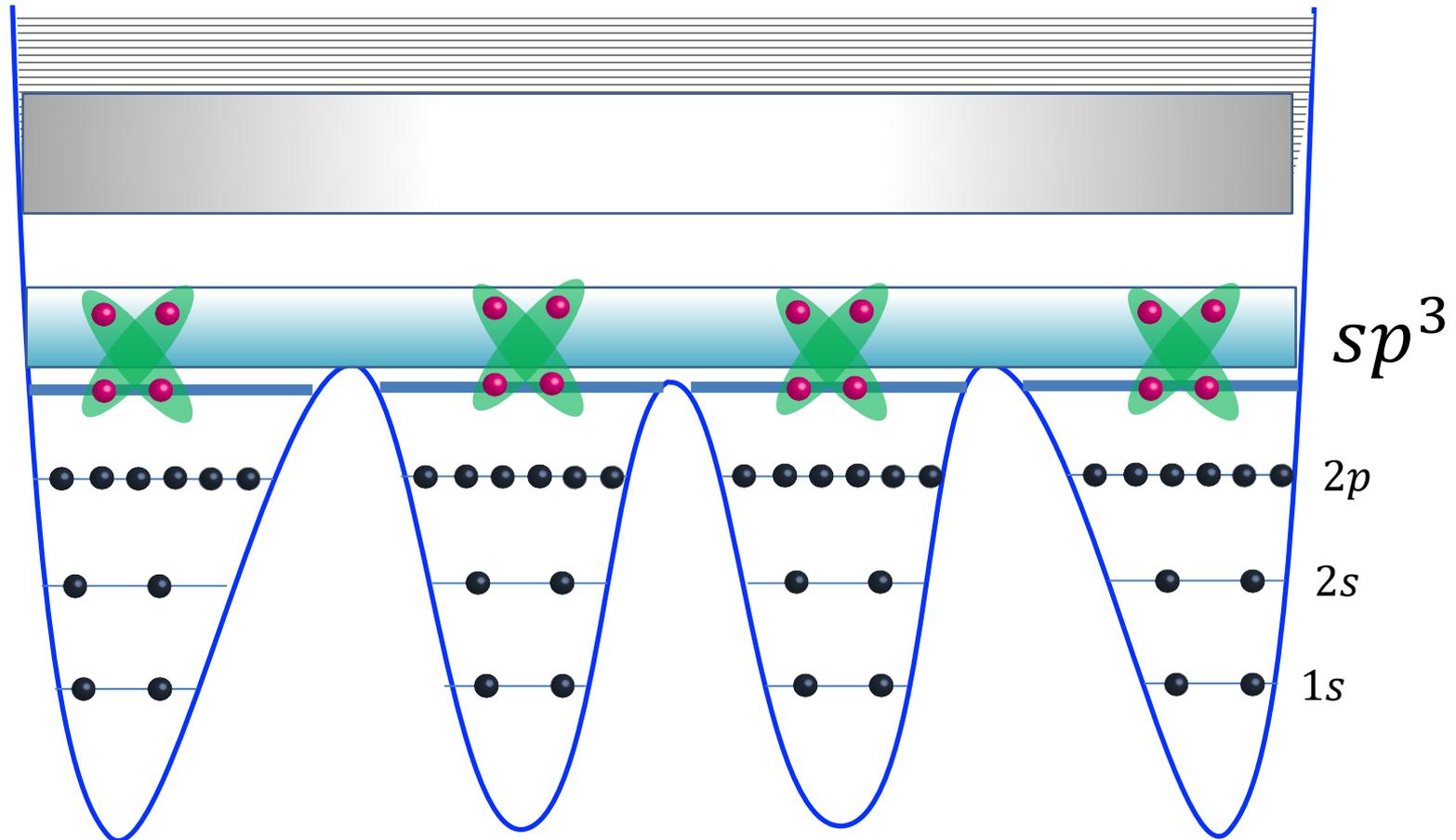


$$I_e = n_e \mu_e q \cdot E$$

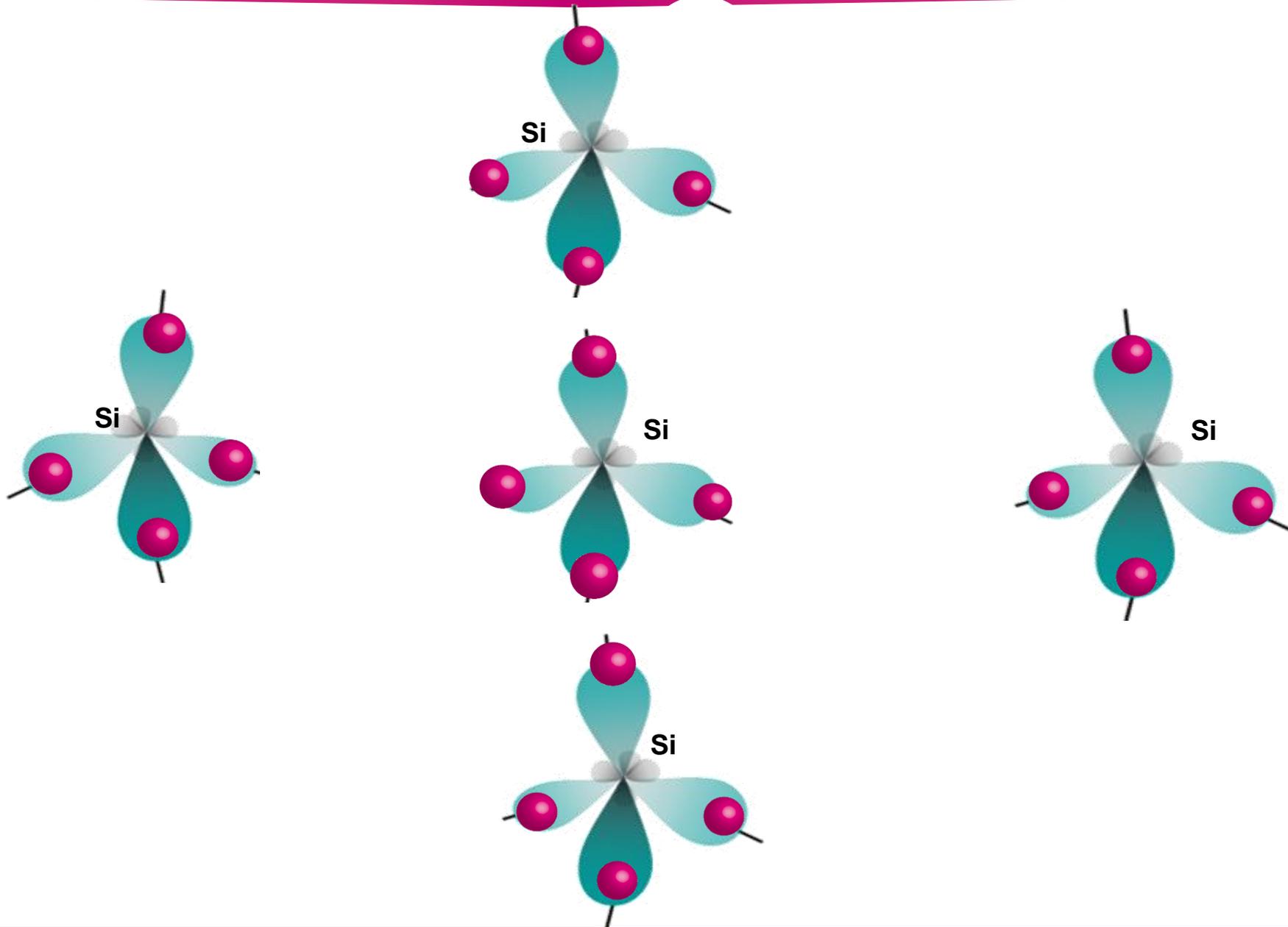
$$I_h = n_h \mu_h q \cdot E$$

伝導電子数と正孔数が少なすぎる！

# 半導体の伝導性を上げるための対策：背景



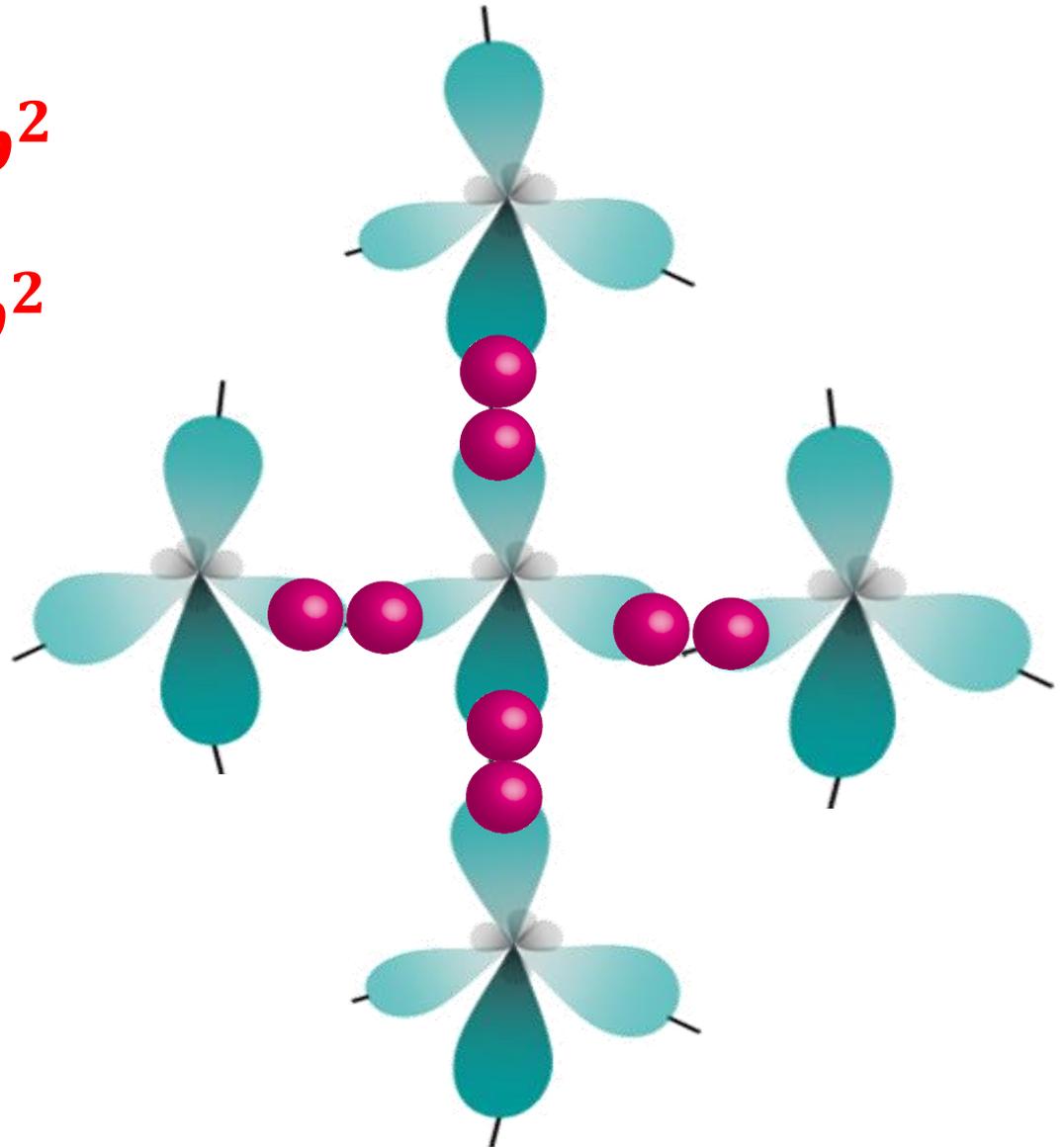
# 半導体の伝導性を上げるための対策



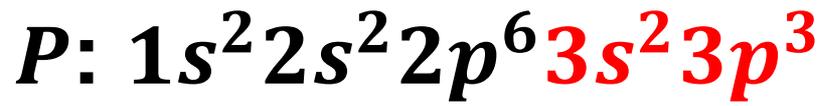
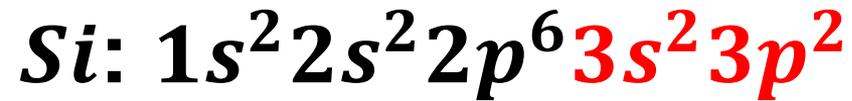
# 半導体の伝導性を上げるための対策

*Si*:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$

*Si*:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$



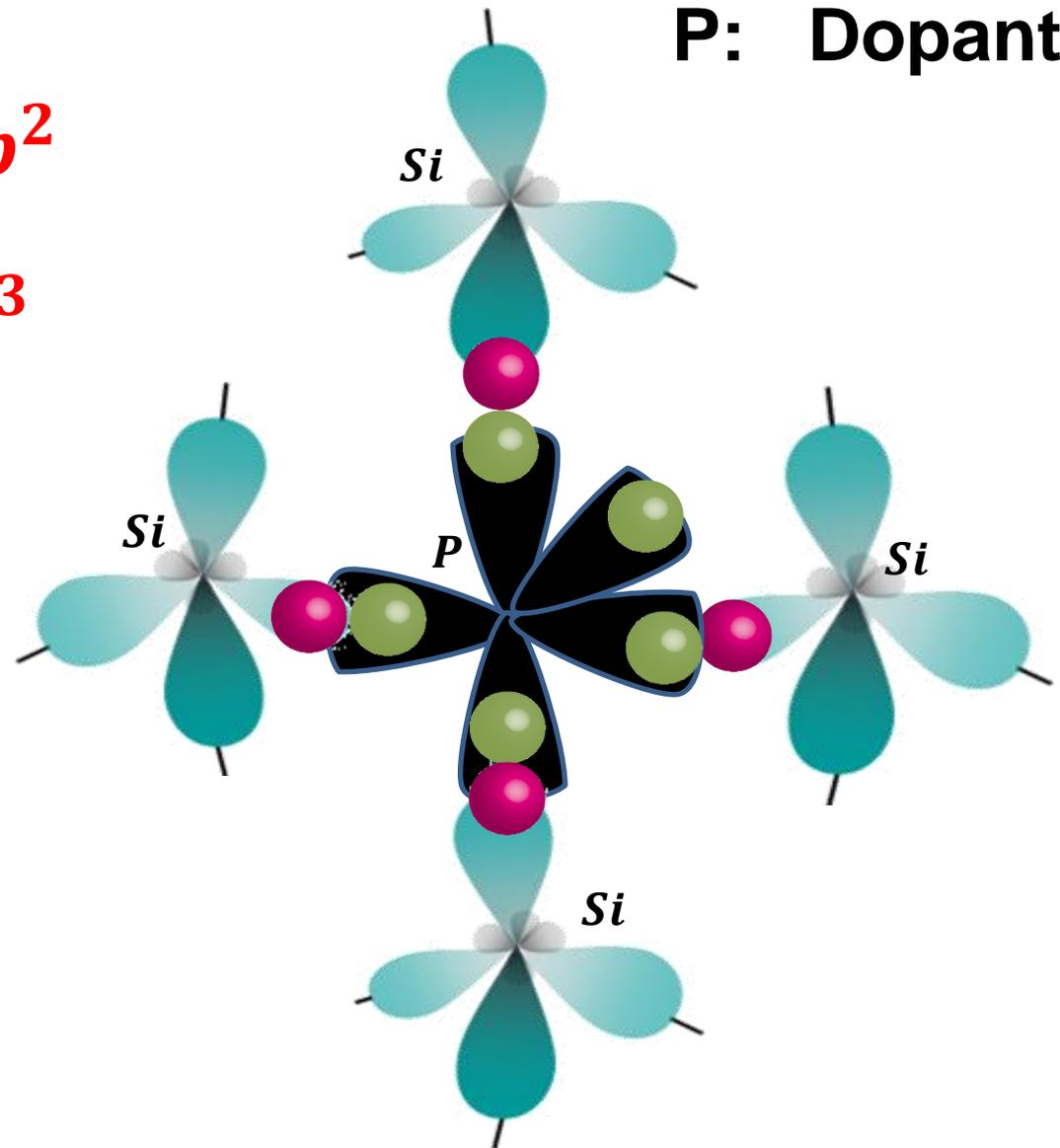
# Si半導体に5価のPをDopingする:



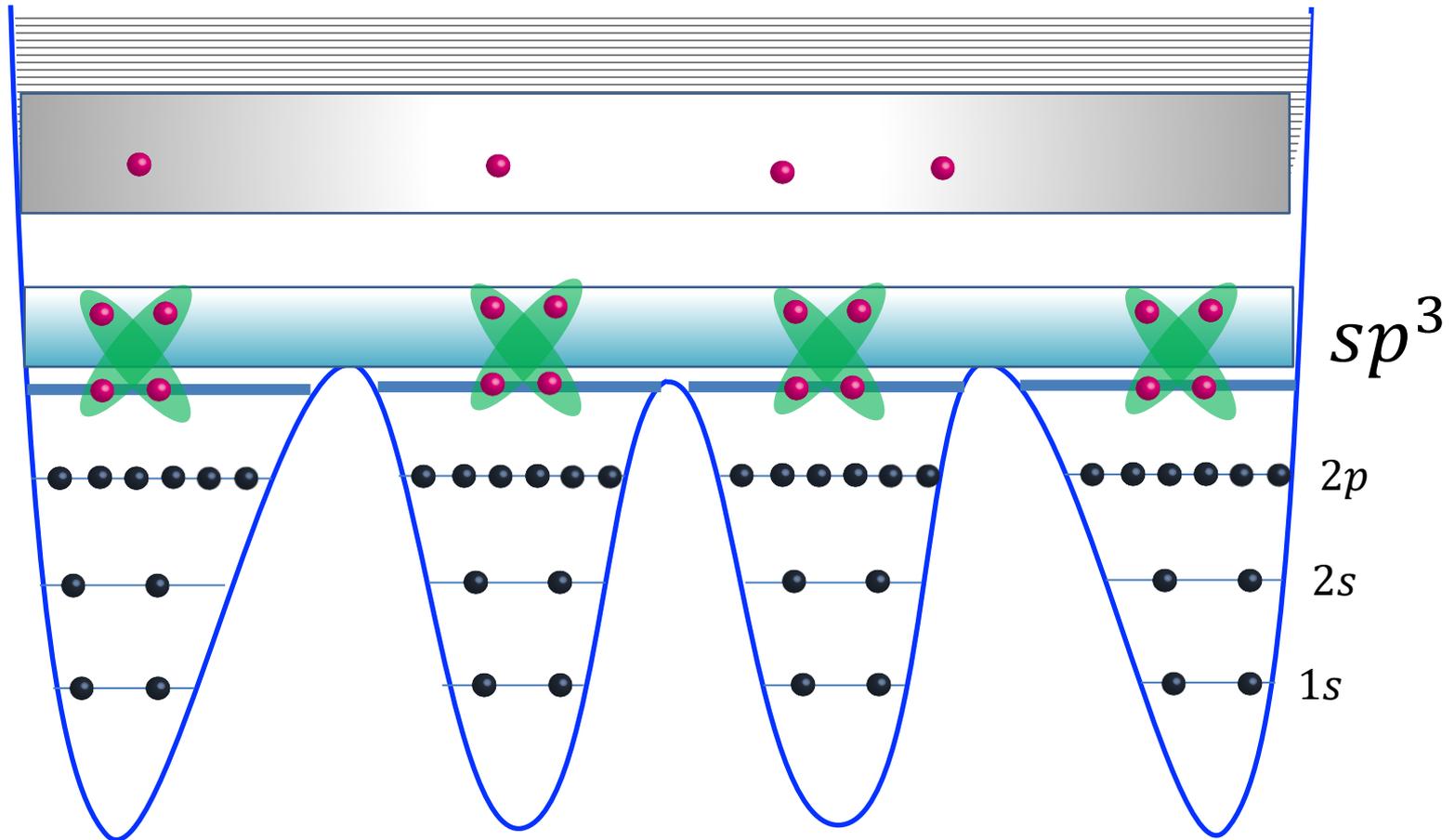
電荷において:



P: Dopant

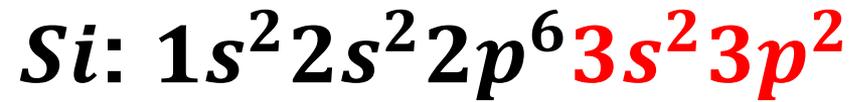


# 半導体の伝導性を上げるための対策：背景

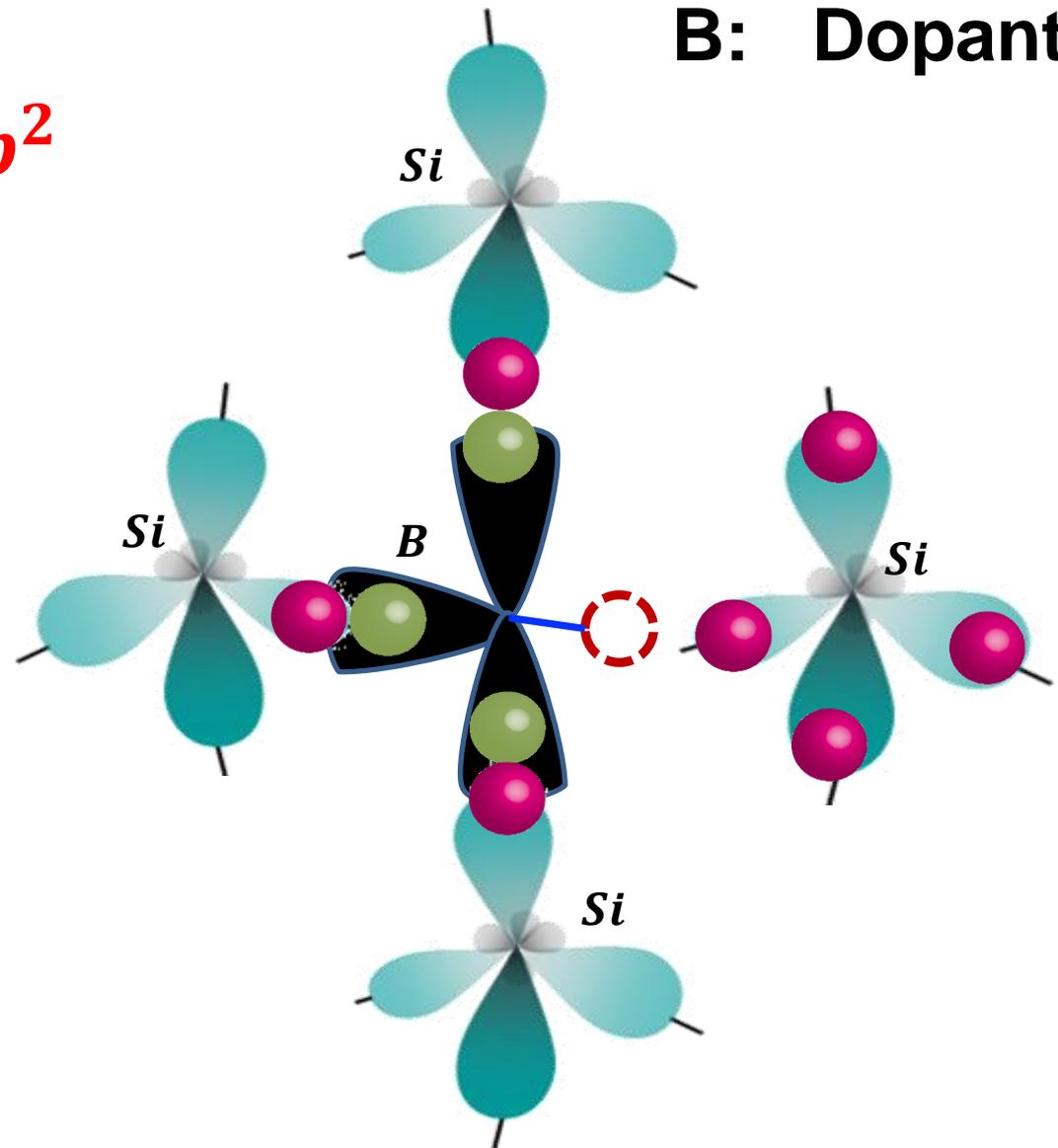
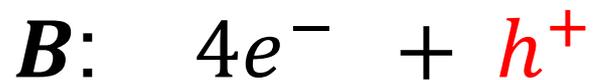


# Si半導体に3価のBをDopingする:

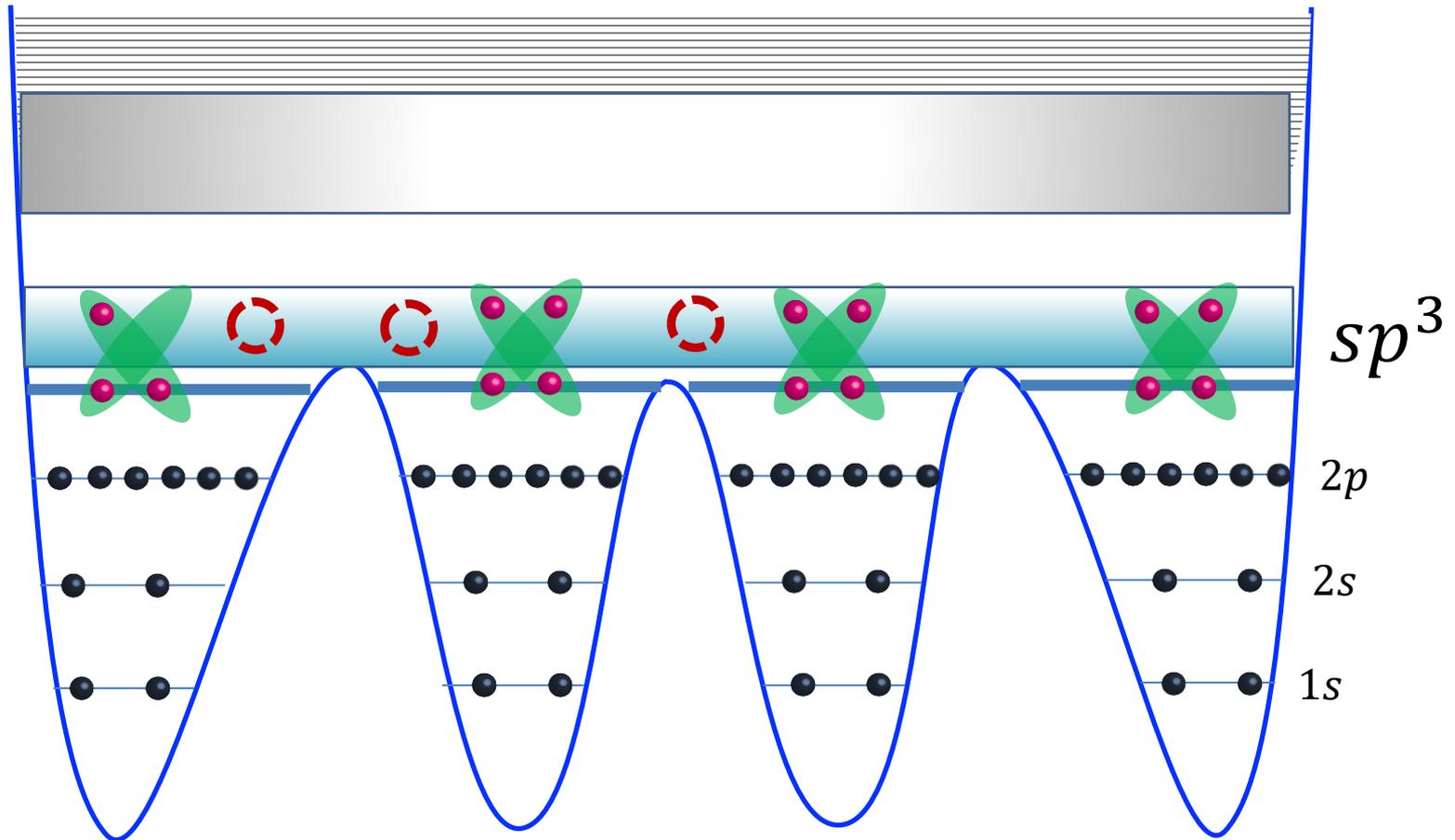
B: Dopant



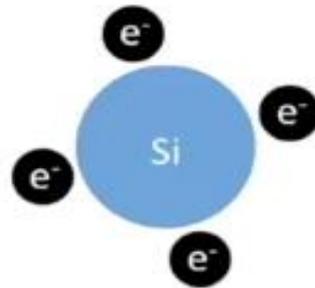
電荷において:



# 半導体の伝導性を上げるための対策：背景

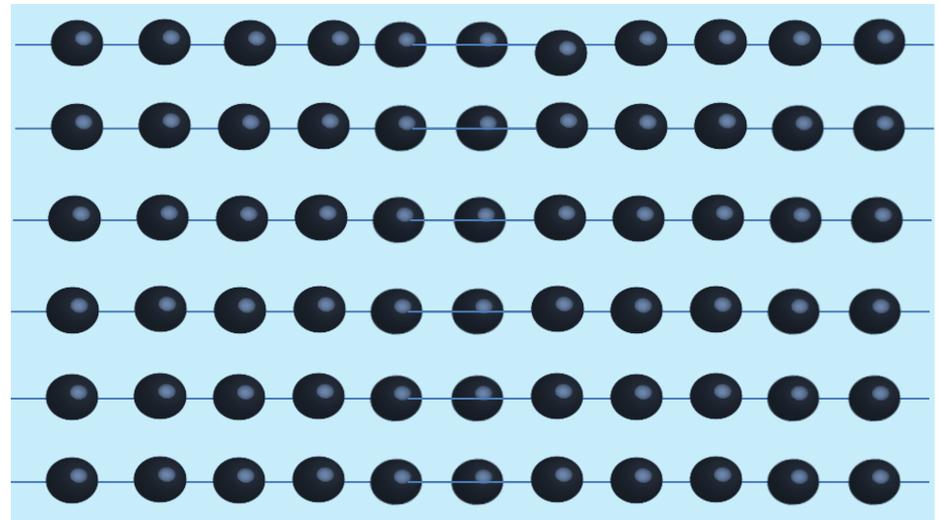
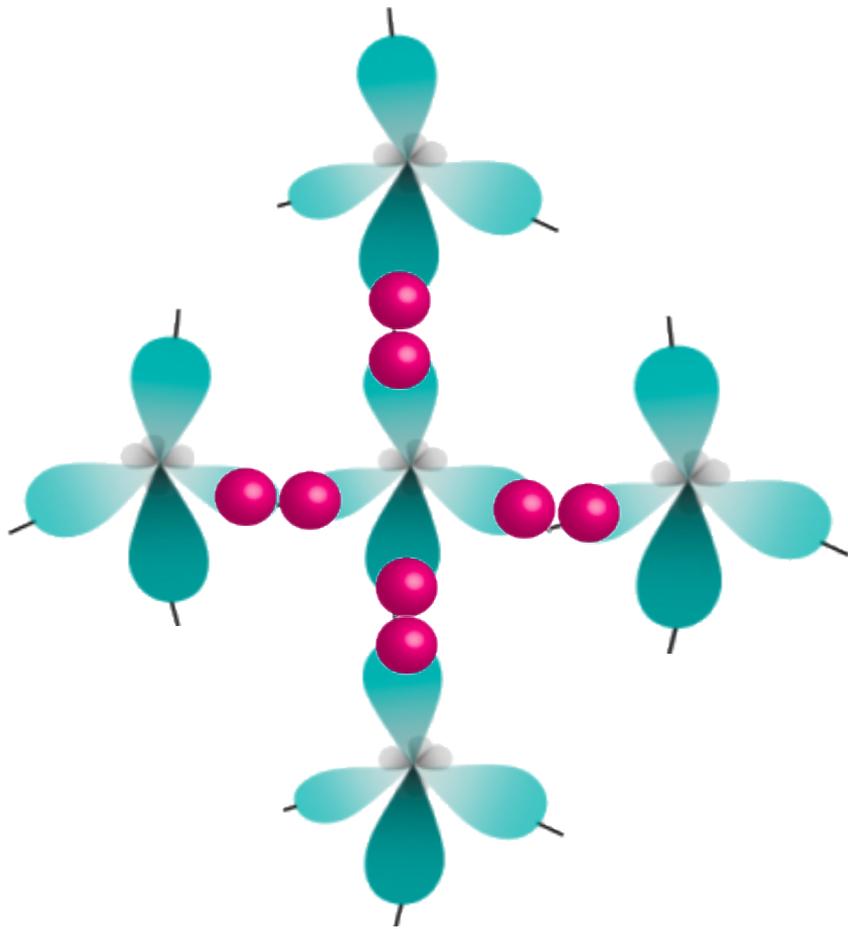


# まとめの動画:

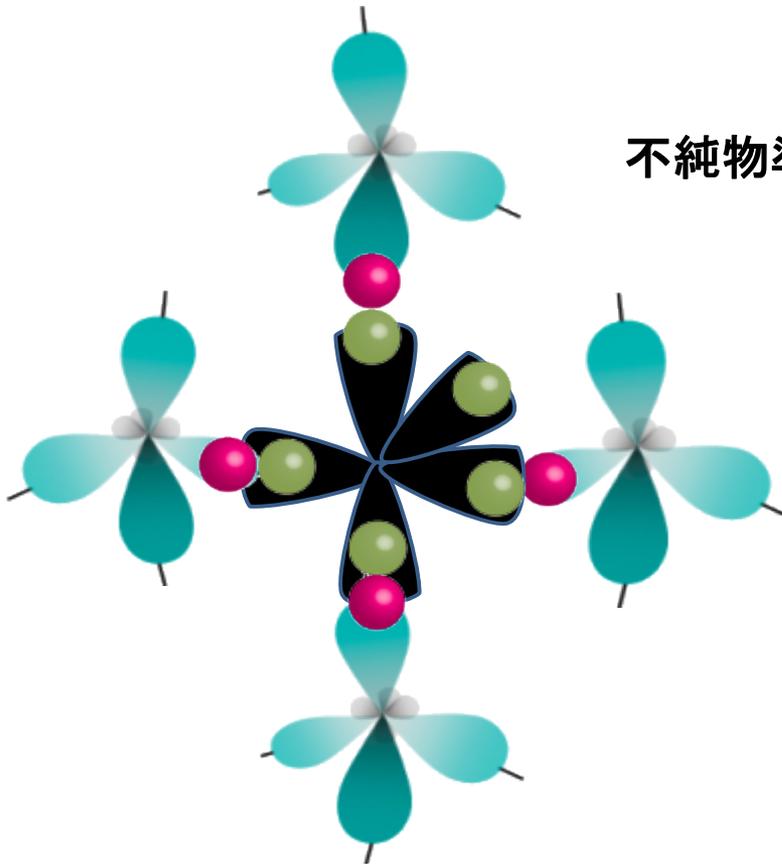




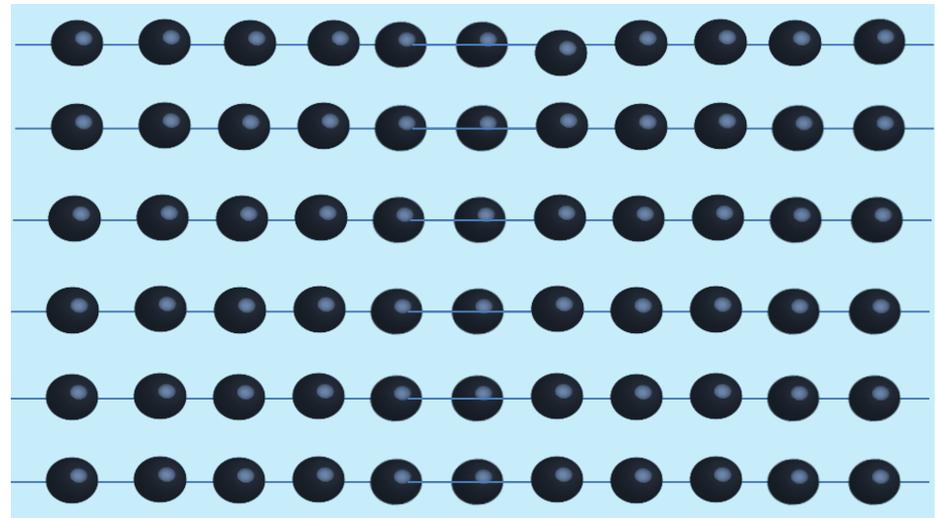
# 通常のシリコンのバンド構造



# 通常のシリコンにPをドーピングした際のバンド構造



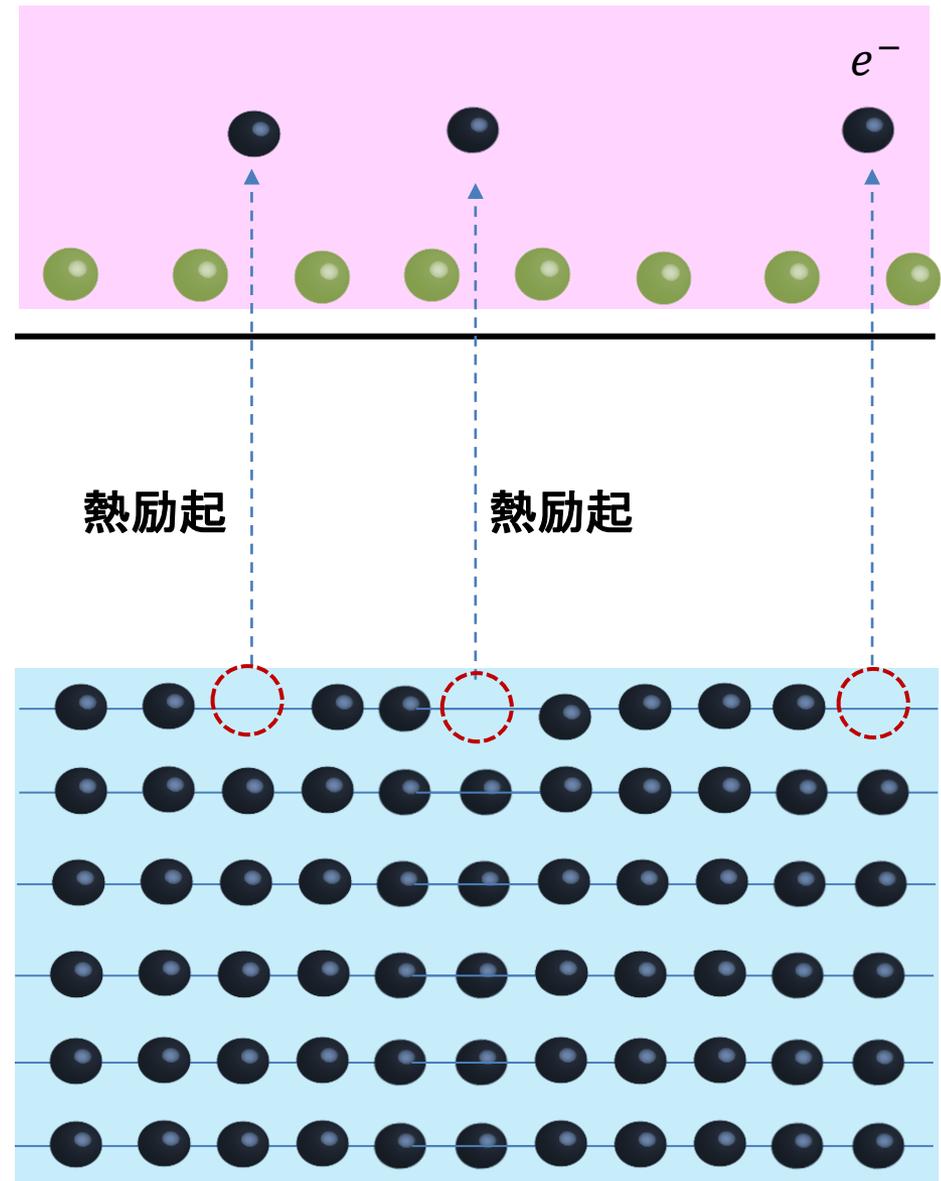
不純物準位



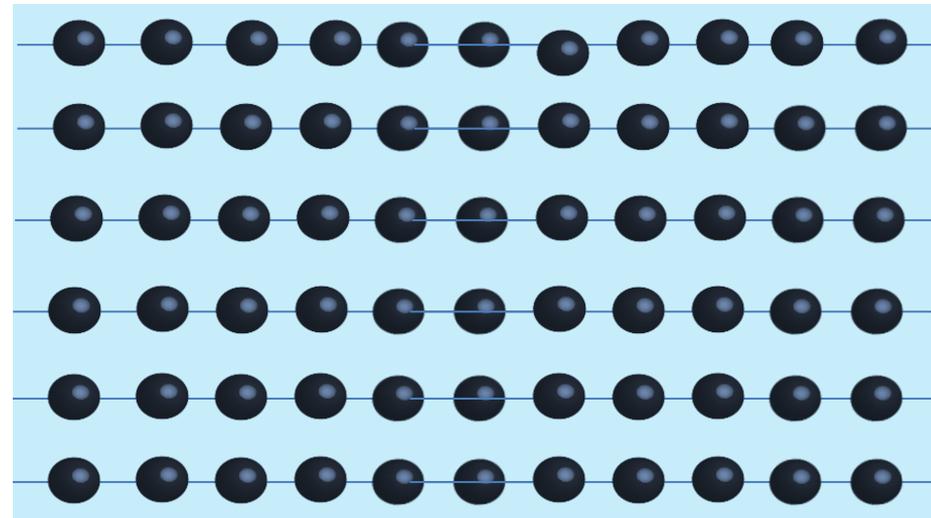
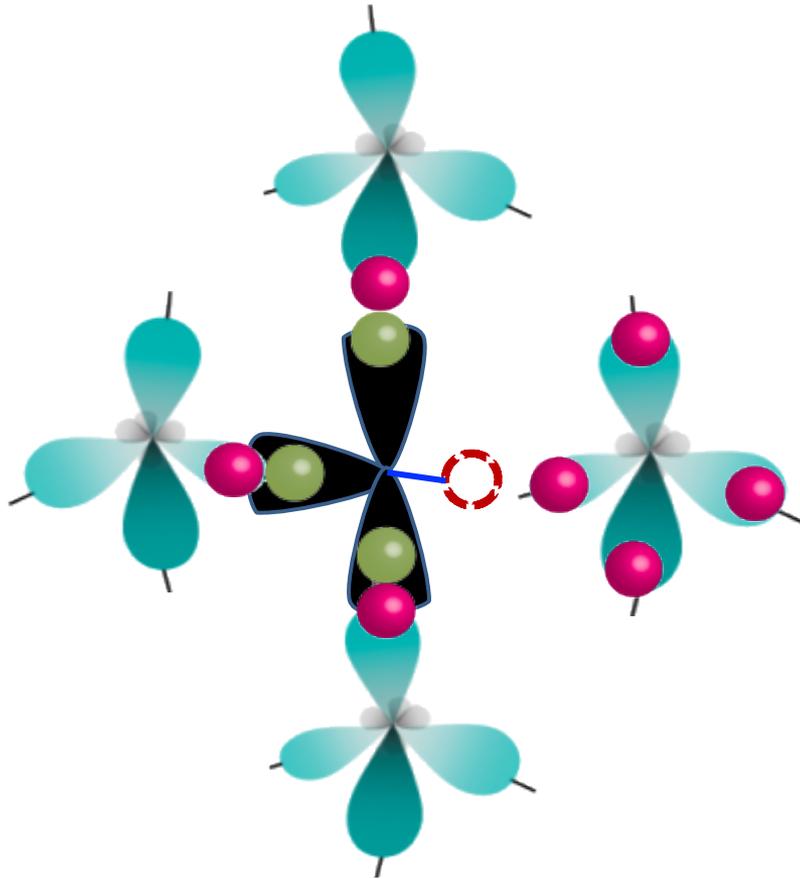
# 通常のSi(P):キャリア数の変化

通常のSiに比べ、  
Pをドーピングした  
Si(P)の方が電子  
の数が多い。

ドーピングして電子の  
数が増えた半導体は  
N型半導体



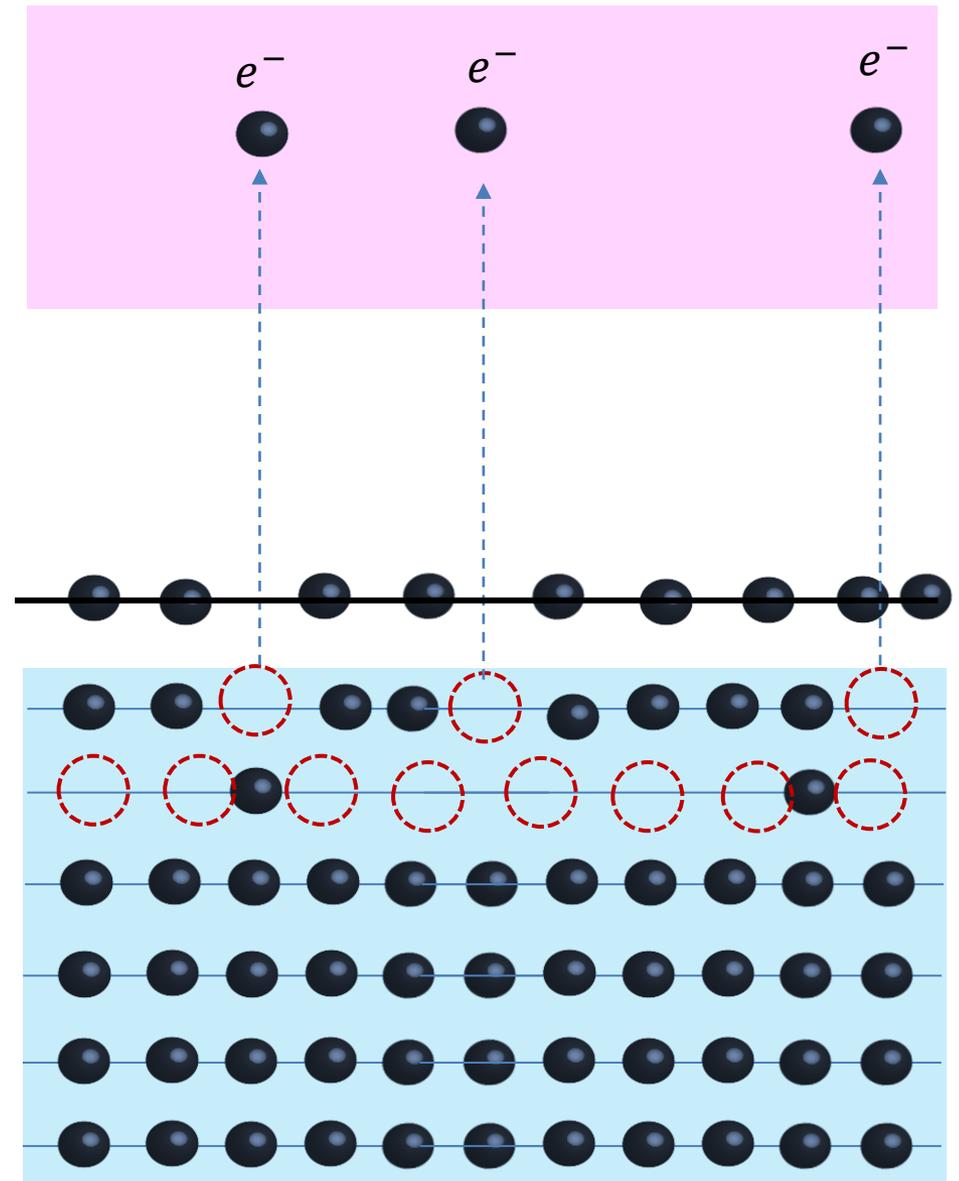
# 通常のシリコンにBをドーピングした際のバンド構造



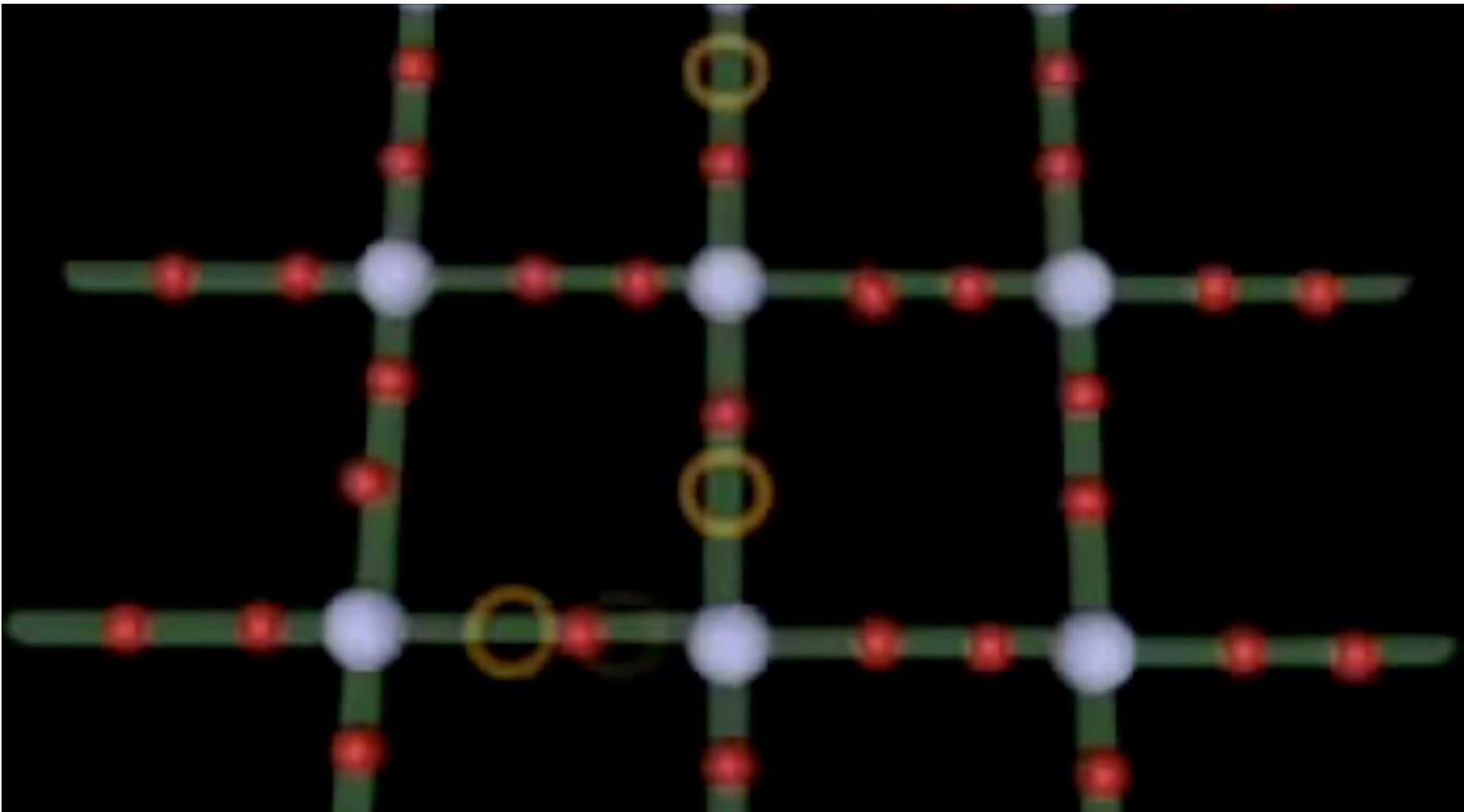
# 通常のSi(B):キャリア数の変化

通常のSiより, Bを  
ドーピングしたSi(B)  
の方がホールの数  
が多い。

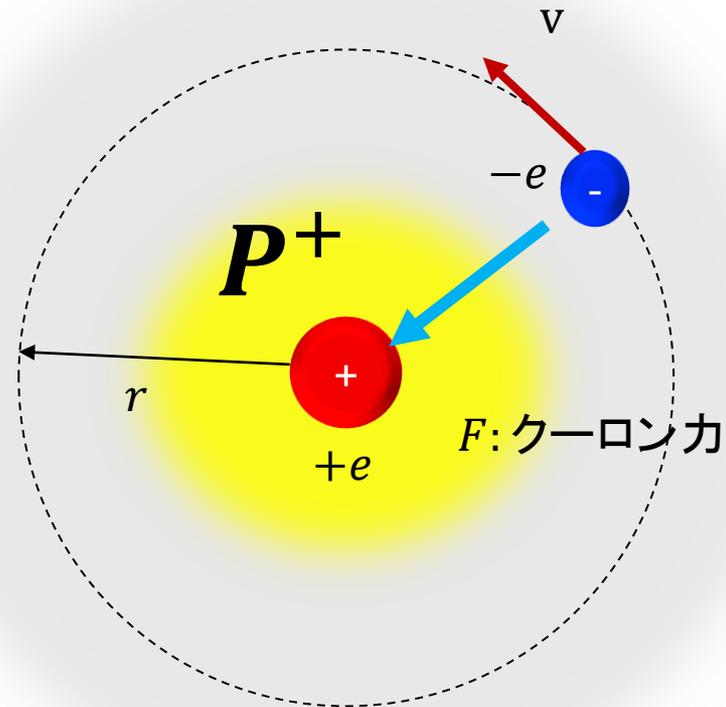
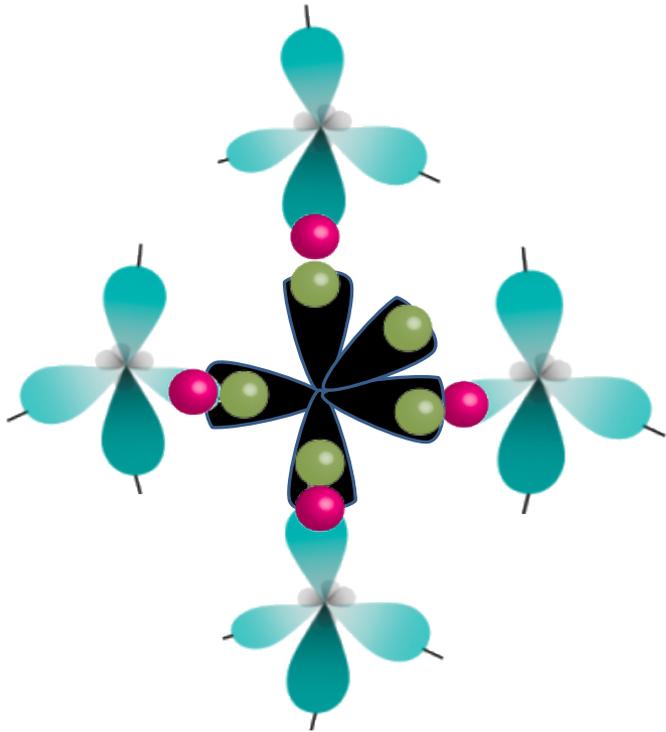
ドーピングしてホール  
の数が増えた半導体  
はN型半導体



# ホールはどのようにして電流を作っている？

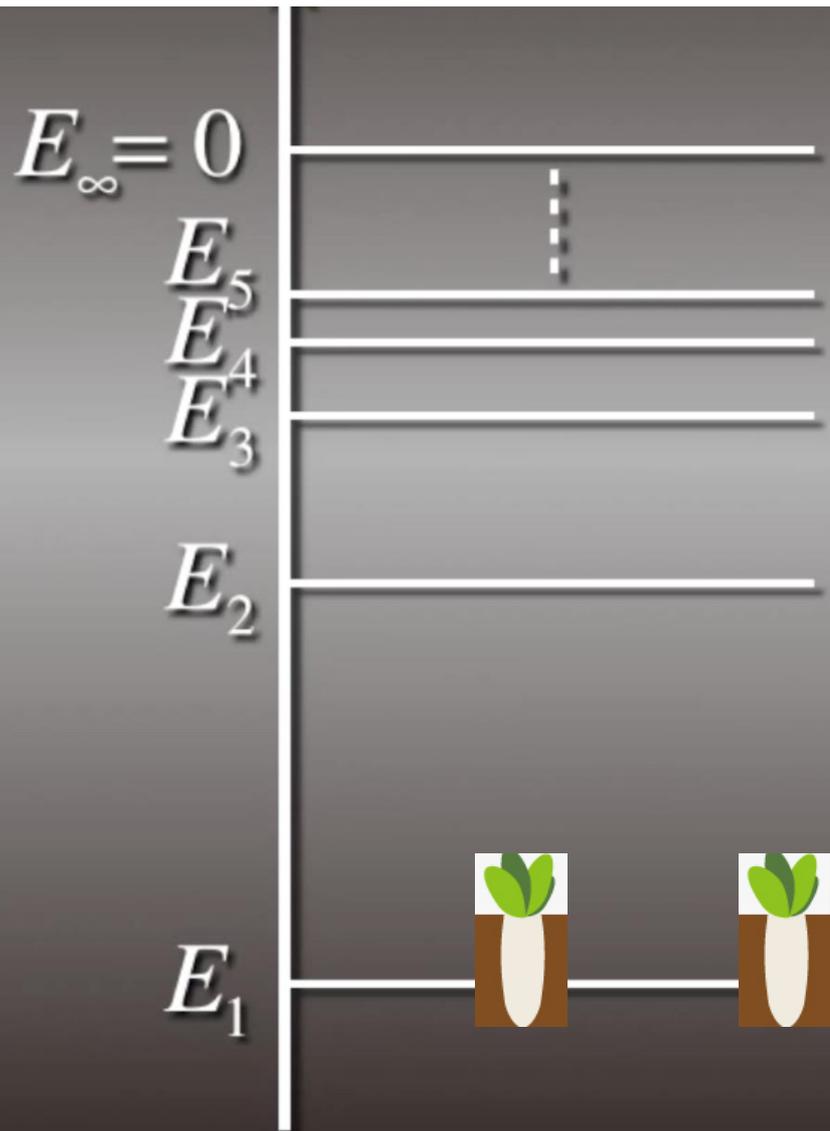


# Dopant準位の計算: ボーアモデル



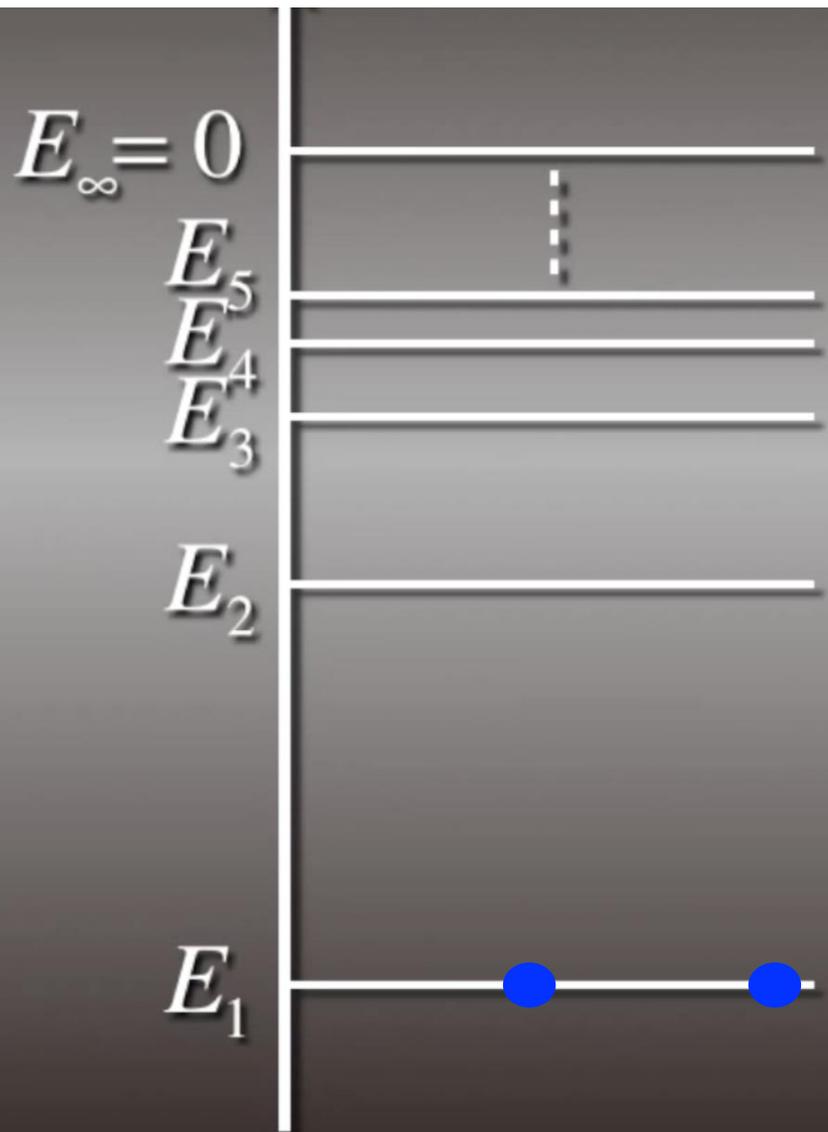
$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$$

# Dopant準位の計算: ボーアモデル


 $n = \infty$ 
 $n = 3$ 
 $n = 2$ 
 $n = 1$ 

$$E = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}$$

# Dopant準位の計算： 電子準位


 $n = \infty$ 

$$E = -\frac{m^* e^4}{8\varepsilon^2 h^2} \frac{1}{n^2}$$

シリコンの比誘電率

 $n = 3$ 

$$\varepsilon = 12\varepsilon_0$$

 $n = 2$ 

電子の有効質量:

$$m_e^* = 0.33m_0$$

 $n = 1$ 

$$E_{1e} = 0.032eV$$

$$h = 6.63 \times 10^{-34} [J \cdot s]$$

$$e = 1.6 \times 10^{-19} [C]$$

$$1eV = 1.6 \times 10^{-19} [J]: \text{電子ボルト}$$

$$c = 3 \times 10^8 [m/s]$$

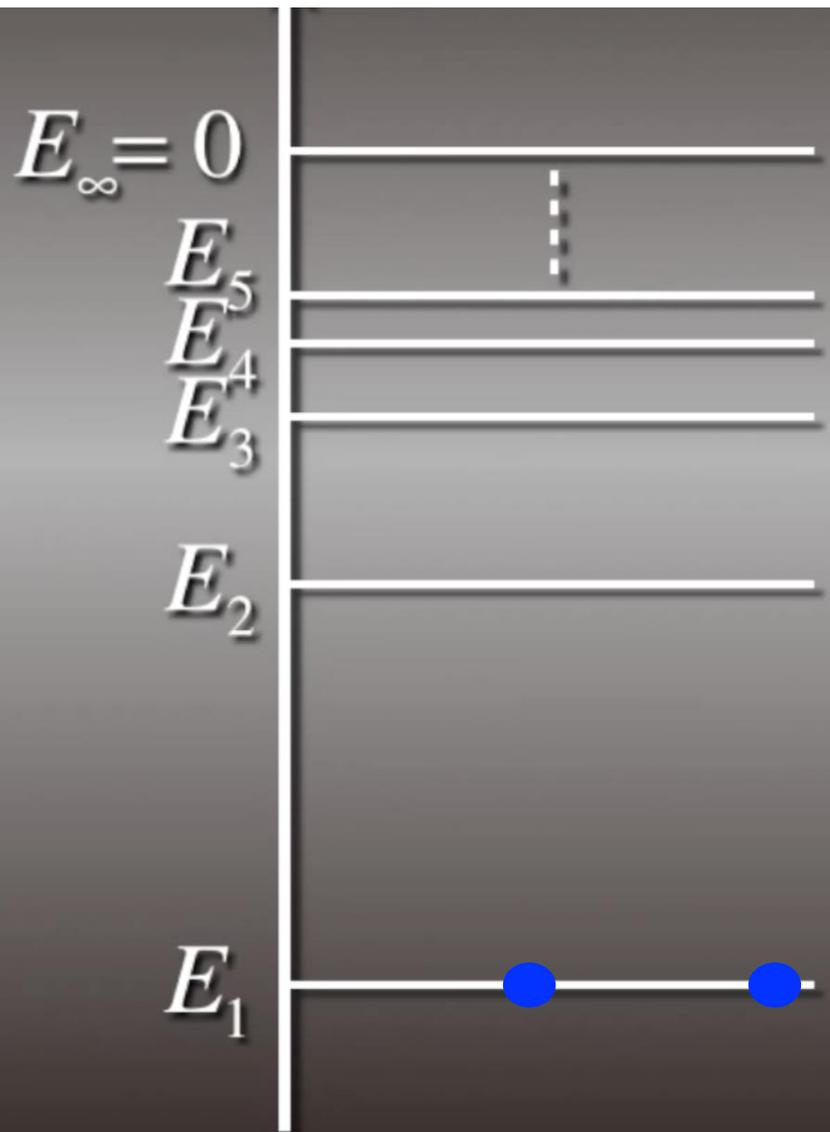
$$m = 9.1 \times 10^{-31} [kg]$$

$$1nm = 1 \times 10^{-9} [m]$$

$$E = - \frac{0.33m_0 * e^4}{144 * 8\varepsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}$$

$$E = - \frac{0.33}{144} * 13.6 = 0.031eV$$

# Dopant準位の計算: ホール(正孔)準位


 $n = \infty$ 

$$E = -\frac{m^* e^4}{8\varepsilon^2 h^2} \frac{1}{n^2}$$

シリコンの比誘電率

 $n = 3$ 

$$\varepsilon = 12$$

 $n = 2$ 

ホールの有効質量:

$$m_h^* = 0.55$$

 $n = 1$ 

$$E_{1h} = 0.053 eV$$

# P型半導体 & N型半導体

